THÈSE

présentée à la

FACULTÉ DES SCIENCES DE PARIS

UNIVERSITÉ DE PARIS VII

pour l'obtention du titre

de Docteur ès-Sciences Physique

par

Monique MALINOVSKY-ARDUINI

Sujet de la Thèse :

" Analyse d'un spectre X-UV de la couronne solaire :
détermination des abondances et interprétation des intensités mesurées,
étude critique des méthodes théoriques de physique atomique utilisées pour cette interprétation".

Soutenue le 16 Juin 1975 devant la Commission d'Examen composée de :

M. H. VAN REGEMORTER	Président
Mme S. SAHAL-BRECHOT	Examinateurs
M. R.M. BONNET	
M. M. DUFAY	
M. L. HEROUX	
M. J. HEYVAERTS	
M. A. OMONT	

PARIS 1975

THESE

présentée à la

FACULTE DES SCIENCES DE PARIS

UNIVERSITE DE PARIS VII

pour l'obtention du titre

DE DOCTEUR ÈS-SCIENCES PHYSIQUE

par

MONIQUE MALINOVSKY-ARDUINI

Sujet de la Thèse :

" Analyse d'un spectre X-UV de la couronne solaire : détermination des abondances et interprétation des intensités mesurées, étude critique des méthodes théoriques de physique atomique utilisées pour cette interprétation ".

Soutenue le 16 Juin 1975 devant la Commission d'Examen composée de :

M.H.	VAN REGEMORTER	Président
Mme	S. SAHAL-BRECHOT	Examinateurs
M.	R.M. BONNET	
M.	M. DUFAY	
M.	L. HEROUX	
M.	J. HEYVAERTS	
M.	A. OMONT	

PARIS 1975

UNIV.
LEIDEN
BIBL.

REMERCIEMENTS

Qu'il me soit permis de remercier ici, toutes les personnes sans lesquelles ce travail n'aurait jamais été mené à bien :

M. R.M. BONNET qui m'a accueillie au Laboratoire de Physique Stellaire et Planétaire, m'a proposé le point de départ de cette thèse et dont l'aide et l'amitié ont été décisives.

M. L. HEROUX de l'"Air Force Cambridge Research Laboratory" qui m'a confié le soin de dépouiller le spectre solaire de haute qualité qu'il avait obtenu le 4 Avril 1969, et avec lequel j'ai étroitement collaboré tant pendant son séjour d'une année au L.P.S.P. que lors de voyages aux U.S.A., pour l'identification des raies observées et la détermination des abondances des éléments.

Mme S. SAHAL, du Département d'Astrophysique Fondamentale de l'Observatoire de Meudon, avec laquelle la partie physique atomique de ce travail a été directement accomplie , qui a constamment suivi la marche de mon travail et m'a apporté son aide indispensable durant ces quatre dernières années.

M. H. VAN REGEMORTER qui a accepté de présider le jury de cette thèse et qui s'est intéressé à ce travail.

MM. A. OMONT, M. DUFAY, J. HEYVAERTS qui ont bien voulu faire partie du jury.

MM. H. NUSSBAUMER, D. FLOWER, J. DUBAU ainsi que Mmes M. CORNILLE, M. LOULERGUE, N. FEAUTRIER avec lesquels j'ai eu de nombreuses et fructueuses discussions.

MM. W. EISSNER, M. JONES, H. SARAPH qui ont accepté de mettre à ma disposition les programmes de calculs numériques.

MM. les informaticiens de Verrières qui m'ont aidée à adapter ces programmes sur l'ordinateur CDC6600 du C.N.E.S.

Mmes M. ORINE et C. SCHOETERS qui se sont chargées avec diligence de la partie matérielle du travail de rédaction.

INTRODUCTION

L'origine de ce travail a été le dépouillement d'un spectre du disque solaire, enregistré à l'aide de détecteurs photoélectriques, de façon continue entre 50 Å et 300 Å, et dans quatre intervalles de longueurs d'onde, choisis pour l'observation des raies de résonance des ions NV, OIV, NeVIII, MgX de la série isoélectronique du lithium. Le spectromètre UV, embarqué à bord d'une fusée aérobie tirée le 4 Avril 1969 et culminant à 247 km, a fourni un spectre sans résolution spatiale mais avec une résolution spectrale de 0.25 Å dans le domaine des courtes longueurs d'onde (50 Å - 300 Å) et de 0.80 Å dans les longueurs d'onde supérieures.

Pour la première fois, grâce à la calibration soignée de l'appareil, des intensités absolues ont pu être déterminées dans ce domaine de longueurs d'onde, avec une précision variant entre 15% et 25% selon la région du spectre.

Cette expérience a été réalisée par L. Heroux de "Air Force Cambridge Research Laboratory" et est décrite dans Heroux et al (1972) (article 1).

L'analyse détaillée du spectre faite par Malinovsky et Heroux (1973) (article 2) a permis d'identifier environ 150 raies d'émission provenant des éléments : O, Ne, Mg, Si, S, Fe, Ni, dans différents états d'ionisation. Dans ce domaine de longueurs d'onde, les raies observées proviennent d'atomes plusieurs fois ionisés émettant dans la couronne et dans la zone de transition chromosphère-couronne.

Ces régions de l'atmosphère solaire sont des plasmas très dilués dont la densité électronique N_e varie de $10^{10} cm^{-3}$, dans le bas de la zone de transition, à $10^7 cm^{-3}$ dans la haute couronne, et se trouvant à des températures électroniques T_e très élevées, situées entre 10^5 °K et $3\ 10^6$ °K . Ces conditions de température et de densité impliquent que les niveaux des ions ne sont pas peuplés suivant les lois de l'équilibre thermodynamique local. En particulier l'état fondamental est surpeuplé d'un facteur 10^8 environ, si bien que, malgré la température très élevée du milieu, les raies interdites entre niveaux de l'état fondamental sont aussi intenses que les raies X.U.V. permises provenant des niveaux excités.

Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41548908_0033

L'interprétation de l'intensité de ces raies est un moyen d'information sur les conditions physiques règnant dans ces régions de l'atmosphère solaire.

L'énergie en erg s^{-1} émise dans toutes les directions à la fréquence $\nu_{\alpha\alpha'}$ lorsqu'un atome effectue une transition d'un niveau α' vers un niveau inférieur α, est, par définition, l'émissivité par atome de la raie :

$$\varepsilon(\alpha' \rightarrow \alpha) = N_{\alpha'} A(\alpha' \rightarrow \alpha) h \nu_{\alpha\alpha'}$$

$N_{\alpha'}$ est la population du niveau de l'ion telle que :

$$\sum_{\alpha'} N_{\alpha'} = 1$$

et $A(\alpha' \rightarrow \alpha)$ est la probabilité d'émission spontanée.

Cette émissivité est fonction de la température T_e et de la densité N_e du milieu émissif.

La population $N_{\alpha'}$ d'un niveau de l'ion est déterminée par tous les processus susceptibles de peupler et de dépeupler le niveau. Dans ces processus, l'excitation et la désexcitation par collisions électroniques et protoniques, interviennent au même titre que l'émission spontanée, ainsi que l'émission induite et l'absorption par le rayonnement local. La couronne, étant un plasma optiquement mince, (sauf pour les raies de l'hélium), le rayonnement incident est le rayonnement continu provenant de la protosphère. L'ion étant principalement dans l'état fondamental, les processus d'ionisation n'interviennent pas dans le calcul des populations des niveaux excités.

Un ordre de grandeur des quantités décrivant ces différents processus, donne une idée de leur importance relative.

- Une valeur caractéristique des coefficients d'excitation électronique est 10^{-8} $s^{-1}cm^3$.

  Les collisions induites par les protons ne concurrencent les collisions induites par les électrons que dans les transitions entre niveaux de structure fine. Ceci peut ne plus être vrai dans les éruptions solaires, où des jets de protons énergétiques peuvent alors être en partie responsables de l'excitation.

- Les probabilités d'émission spontanée sont de l'ordre de 10^{10} s^{-1} pour les raies dipolaires électriques, et de quelques dizaines de s^{-1} pour les raies dipolaires magnétiques.

- Le rayonnement photosphérique peut être assimilé à celui d'un corps noir aux environs de 6000°K, affecté d'un facteur de dilution géométrique W.
  L'émission et l'absorption induites par ce rayonnement ne seront donc importantes que dans les raies visibles correspondant à des transitions entre niveaux de structure fine.

Ainsi pour la raie verte du Fe XIV à 5303 Å, la probabilité d'absorption induite est 0.6 s^{-1} près du bord solaire (W = 0.5) alors que le taux d'excitation par collision électronique est de 1 s^{-1} pour une densité $N_e = 10^8$ cm^{-3}.

On doit tenir compte de tous ces processus pour écrire les équations de l'équilibre statistique en incluant tous les niveaux susceptibles de provoquer des cascades importantes sur les niveaux de la transition considérée. Cependant, pour un grand nombre de raies de ce spectre, l'approximation de l'atome à deux niveaux simplifie considérablement les équations de l'équilibre statistique. Cette approximation, dans laquelle on suppose que le niveau supérieur de la transition est uniquement peuplé par collisions électroniques à partir de l'état fondamental et se désexcite radiativement vers l'état fondamental, n'est justifiée que si l'atome ne possède pas de niveau métastable.

Sauf les raies de l'hélium pour lesquelles il faut résoudre l'équation de transfert de rayonnement, les raies observées sont optiquement minces, si bien que l'énergie en ergs s^{-1}, observée dans une raie résulte d'une simple intégration de l'émissivité le long de la ligne de visée :

$$I(\alpha' \rightarrow \alpha) = \int_R \varepsilon(\alpha' \rightarrow \alpha)\, N(\text{ion})\, dV$$

ou N (ion) est la densité par unité de volume des ions dans la région d'émission R.

L'exploitation des informations que l'on peut déduire des intensités des raies observées, et dont le résultat est donné dans les trois articles inclus dans cette thèse, a permis de :

1) faire une détermination précise, suivant la méthode de Pottasch (1964), des abondances relatives des éléments responsables des émissions observées. Pour cela, comme il est expliqué dans l'article 2, on a sélectionné les raies pour lesquelles l'approximation de l'atome à deux niveaux était valable. Pour les raies permises, utilisées dans ce travail, les sections de choc ont été calculées par Blaha (1969) dans l'approximation de Bethe II, et on a choisi dans la littérature les forces d'oscillateurs les meilleurs possibles. Compte tenu, d'une part, qu'en général plusieurs raies d'un même ion sont observées et qu'un même élément est vu dans différents degrés d'ionisation, d'autre part, que la calibration a été faite dans tous les domaines de longueurs d'onde du spectre, les abondances relatives données dans l'article 2 sont considérées comme les meilleures obtenues jusqu'à présent.

2) faire un diagnostic spectroscopique sur les paramètres physiques N_e,T_e du milieu.

Comme ces raies sont émises par un plasma mince, leurs intensités ne pourront fournir aucun diagnostic en profondeur sans faire d'hypothèses sur la géométrie et la symétrie du milieu. Il faut noter ici que même avec des observations réalisées avec une résolution spatiale, on ne peut déterminer qu'une valeur moyenne de N_e et T_e intégrée sur la ligne de visée.

En faisant l'hypothèse, couramment admise, que deux raies d'un même ion sont émises dans la même région, le rapport de leurs intensités observées est simplement égal au rapport de leurs émissivités.

On peut trouver dans le spectre des raies dont le rapport des émissivités est fonction de N_e et T_e.

- pour faire un diagnostic en température, il faut choisir deux raies correspondant à des transitions dont les niveaux supérieurs soient suffisamment éloignés pour que les coefficients d'excitation par collisions des deux transitions varient différemment avec la température. C'est le cas de certaines raies d'ion de la série isoélectronique du lithium qui ont servi à déterminer la température électronique , de la région de transition (cf. article 1)
- pour faire un diagnostic en densité, il est nécessaire que l'ion possède au moins un niveau métastable. Dans ce cas le système d'équations de l'équilibre statique doit être résolu exactement. C'est ce qui a été fait pour l'ion OV (article 3), pour lequel on a calculé de nouvelles valeurs des probabilités de transition et des sections de choc en incluant neuf configurations dans la structure atomique. On a tenu compte, en particulier, des effets de l'interaction de configuration et de l'interaction spin orbite dans la structure atomique, ainsi que des effets d'échange et de résonances dans le calcul des sections efficaces. L'influence de la précision des données atomiques sur les valeurs des paramètres physiques(N_e,T_e), déduites des intensités observées, est également discutée dans cet article.

La première partie de cette thèse est consacrée à une critique des différentes méthodes théoriques, actuellement disponibles, pour calculer les paramètres atomiques ; en prenant pour exemple les calculs réalisés pour l'ion OV et l'ion FeX

I - STRUCTURE ATOMIQUE

1. Généralités : Hamiltonien d'un atome à plusieurs électrons, difficultés liées aux interactions entre électrons.

Les mouvements des électrons dans un atome ou un ion sont gouvernés d'une part, par les forces électrostatiques que sont l'attraction entre les électrons et le noyau et la répulsion entre les électrons, d'autre part, par les forces magnétiques dues au mouvement orbital et au spin des électrons. Le système (noyau + électrons) est décrit par un hamiltonien contenant différents termes dûs à ces forces :

$$H^T = H_{\text{électrostatique}} + H_{\text{magnétique}}$$

Les fonctions propres décrivant les états stationnaires du système, et les valeurs propres E donnant les énergies de ces états, sont solutions de l'équation de Schrödinger indépendante du temps

$$H^T\psi = E\psi \qquad (1.1)$$

Sauf pour l'atome d'hydrogène, cette équation ne peut être résolue rigoureusement. Moyennant certaines hypothèses, des solutions approchées peuvent être obtenues.

La masse du noyau d'un atome ou d'un ion comportant N électrons étant considérablement plus grande (plusieurs milliers de fois) que celle des électrons, le centre de masse de l'atome coïncide pratiquement avec le noyau supposé immobile à l'origine des coordonnées (ce qui revient à négliger l'effet d'entraînement du noyau).

L'hamiltonien électrostatique s'écrit alors :

$$H_{\text{électrostatique}} = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{1}{2m_\ell}\vec{p}_i^{\,2} - \frac{Ze^2}{r_i}\right) + \sum_{i>j}^{N} \frac{e^2}{r_{ij}} \qquad (1.2)$$

L'indice i sert à numéroter arbitrairement les électrons de 1 à N, r_i est la distance de l'électron i au noyau, $\vec{P}_i$ son impulsion, m_e sa masse et $r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ est la distance séparant l'électron i et l'électron j.

Le premier terme de l'hamiltonien (1.2) représente l'énergie cinétique totale du système des N électrons, le second provient de l'attraction exercée sur chacun d'eux par le noyau de charge + Ze, le dernier décrit la répulsion mutuelle des électrons.

L'hamiltonien magnétique comprend les intéractions "spin orbit", les intéractions "spin other orbit",ainsi que les interactions "spin-spin" et "orbit-orbit". Sauf dans un très petit nombre de calculs sur des atomes simples, l'interaction magnétique prédominante est le terme d'interaction spin orbite,qui décrit l'interaction du moment magnétique de chaque électron avec le champ magnétique dû au mouvement de l'électron dans le champ du noyau. Une méthode approchée pour décrire cette interaction spin orbite consiste à inclure pour chaque électron un terme de la forme

$$f_i(s.o) = \xi(r_i)\, \vec{L}_i.\vec{S}_i \qquad (1.3)$$

où $\vec{L}_i$ et $\vec{S}_i$ sont respectivement le moment orbital et le spin de l'électron i.

Thomas (1926) et Frankel (1926) ont montré que dans un champ central dérivant d'un potentiel U (r_i), la fonction ξ (r_i) s'exprime par :

$$\xi(r_i) = \frac{e}{2m_\ell^2 c^2} \frac{\partial U(r_i)}{\partial r_i} \qquad (1.4)$$

Les interactions "spin other orbit" désignent l'interaction du spin d'un électron avec l'orbite d'un autre électron. Jones (1970),suivant l'approche de Blume et Watson (1962),a montré que ce terme "spin other orbit" se réduit à l'interaction des électrons des couches incomplètes avec les électrons des couches complètes. Cette interaction se met alors sous la même forme que l'interaction spin orbit (1.3) donnée pour une particule,et a pour effet d'écranter la charge nucléaire. Il en résulte que le hamiltonien magnétique peut toujours se mettre sous la forme

$$H_{\text{magnétique}} = \sum_{i=1}^{N} \xi(r_i) L_i . S_i = \sum_{i=1}^{N} f_i(s.o) \qquad (1.5)$$

dans laquelle $\xi(r_i)$ aura une valeur modifiée par rapport à (1.4).

Les termes "spin-spin" qui expriment l'interaction du spin d'un électron avec le spin de l'autre, et "orbit-orbit" qui expriment l'interaction de l'orbite d'un électron avec l'orbite de l'autre, sont négligés en général.

La théorie du spectre atomique est donc basée sur les propriétés du hamiltonien approché :

$$H^T = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{1}{2m_e} \vec{p}_i^{\,2} - \frac{Ze^2}{r_i} + \xi(r_i) \vec{L}_i . \vec{S}_i \right) + \sum_{i>j=1}^{N} \frac{e^2}{r_{ij}} \qquad (1.6)$$

En l'absence du terme d'interaction mutuelle dans le hamiltonien, les électrons seraient indépendants et il serait possible de résoudre exactement l'équation de Schrödinger. Ce terme est du même ordre que le terme dû à l'attraction par la charge nucléaire: en effet, le rapport ρ entre ces deux termes est $\rho = \frac{\frac{1}{2} N(N-1)}{NZ} = \frac{N-1}{2Z}$ c'est à dire, que pour un atome peu ionisé ou $N \simeq Z$, il varie entre $\frac{1}{4}$ pour $Z = 2$ et $\frac{1}{2}$ pour Z grand. Ce terme d'interaction mutuelle ne peut donc pas être traité directement par la théorie des perturbations.

Parmi les méthodes approchées de résolution de ce problème, deux des plus importantes sont basées sur l'approximation du champ central, ce sont :

- la méthode statistique de Thomas (1927) et Fermi (1927),
- la méthode "self consistante" de Hartree (1928), Fock (1930).

Ces méthodes sont décrites de façon détaillée dans "The Theory of Atomic Spectra" écrit par Condon et Shortley (1935), ouvrage dénommé T.A.S. dans la suite, et dans "Quautum Theory of Atomic Structure" de Slater (1960), ainsi que dans le livre de Hartree (1957) "The Calculation of Atomic Structures".

D'autres méthodes plus élaborées ont été récemment développées. On trouvera un grand nombre de références dans l'article revue de Weiss (1973).

Des programmes de calculs numériques basés sur les deux premières méthodes précédemment citées sont actuellement disponibles. Le programme utilisé dans ce travail est celui de Eissner et Nussbaumer (1969) modifié par Jones (1970) pour y inclure les corrections relativistes. Ce programme utilise un potentiel de Thomas Fermi modifié et tient compte de l'interaction de configuration dans le développement des fonctions d'onde.

Le programme mis au point par C. Froese Fischer (1969) traduit une méthode Hartree Fock multiconfigurationnelle non relativiste. F. Bely (1972) y a inclu l'interaction spin orbite. Un programme très performant a été mis au point par Hibbert (1970) (1971).

Ces deux méthodes supposent que chaque électron est dans un état stationnaire dans le champ du noyau et des autres électrons, ce qui se traduit par le fait que la fonction d'onde du système est un produit de N fonctions d'onde à une particule ou "spin orbitales". L'hypothèse fondamentale est que l'état de l'atome est bien décrit, en première approximation, par une configuration dans laquelle chaque électron est affecté à une spin orbitale. Pour satisfaire au principe d'exclusion de Pauli, la fonction d'onde représentant un état A du système des N électrons indépendants, doit être antisymétrique pour tous les électrons. Cet état quantique A est alors caractérisé par le ket normé

$$|\Phi^A> = \mathcal{A}|1:\phi_a> |2:\phi_b> \ldots |N:\phi_p> \qquad (1.7)$$

où $\mathcal{A}$ est l'antisymétriseur normé.

Dans l'état A du système, l'électron i est ainsi associé successivement aux différentes spin orbitales $\phi_a, \phi_b, \ldots \phi_N$ par le jeu des permutations contenues dans $\mathcal{A}$. Il est commode d'écrire ce vecteur d'état sous la forme d'un déterminant dit déterminant de Slater:

$$|\Phi^A\rangle = \begin{vmatrix} |1:\phi_a\rangle & \ldots & |1:\phi_p\rangle & \ldots & |1:\phi_N\rangle \\ |2:\phi_a\rangle & \ldots & |2:\phi_p\rangle & \ldots & |2:\phi_N\rangle \\ \vdots & & & & \vdots \\ |N:\phi_a\rangle & \ldots & |N:\phi_p\rangle & \ldots & |N:\phi_N\rangle \end{vmatrix} \qquad (1.8)$$

La deuxième hypothèse commune aux deux méthodes est relative à la forme des spin orbitales ϕ_a. En général, le champ exercé par les autres électrons sur un électron n'est pas à symétrie sphérique, la distribution de charge des autres électrons n'ayant pas elle-même la symétrie sphérique (sauf dans le cas des couches complètes). On suppose néanmoins qu'en première approximation, on peut représenter l'action des autres électrons par un potentiel moyen ayant la symétrie sphérique. On peut alors séparer les variables radiales des variables angulaires et les spin orbitales sont de la forme :

$$\phi_a = \frac{P_{n\ell}(r)}{r} \; Y_\ell^{m_\ell}(\theta,\varphi) \; \chi\left(\frac{1}{2}, m_s\right) \qquad (1.9)$$

où $P_{n\ell}(r)$ est la fonction radiale, $Y_\ell^{m_\ell}(\theta,\varphi)$ est l'harmonique sphérique, fonction propre commune de (L^2, L_z) et $\chi\left(\frac{1}{2}, m_s\right)$ est la fonction de spin de l'électron pour laquelle le nombre quantique m_s ne peut prendre que les valeurs $\pm \frac{1}{2}$.

Afin que les spin orbitales forment une base orthonormée dans l'espace des fonctions d'onde d'une particule, on impose la condition :

$$\int_0^\infty P_{n\ell}(r) \; P_{n'\ell}(r) \; dr = \delta_{nn'} \qquad (1.10)$$

qui s'ajoute à la relation d'orthonormalisation des harmoniques sphériques :

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} Y_\ell^{m\ell}(\Theta,\varphi)\, Y_{\ell'}^{m\ell'}(\Theta,\varphi)\, d\Theta = \delta(\ell,\ell')\,\delta(m_\ell, m_{\ell'}) \qquad (1.11)$$

et de la fonction de spin :

$$\sum_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} \chi(\tfrac{1}{2},m_S)\,\chi(\tfrac{1}{2},m_{S'}) = \delta(m_S, m_{S'}) \qquad (1.12)$$

Les différentes spin orbitales ϕ_a se distinguent alors pas les valeurs différentes de l'ensemble a des nombres quantiques n, ,m_ℓ, m_s. L'ensemble des nombres quantiques a est ordonné suivant une procédure décrite dans T.A.S. (p. 169).

Les deux méthodes diffèrent dans la façon d'obtenir le champ central approximatif, c'est à dire de trouver les fonctions radiales $P_{n\ell}(r)$.

La méthode statistique de Thomas et Fermi est basée sur l'idée d'effet d'écran pour calculer un potentiel central $\upsilon(r)$ qui rende compte de la plus grande partie du terme d'interaction mutuelle. A partir de la solution approchée, la théorie des perturbations permet de calculer complètement l'interaction mutuelle des électrons. Dans cette méthode, le potentiel $\upsilon(r)$ est obtenu en résolvant une équation différentielle indépendante des fonctions radiales.

L'approximation Hartree Fock est une formulation variationnelle du modèle atomique. L'application du principe variationnel à une fonction d'onde d'essai, conduit aux équations de Hartree Fock pour les fonctions radiales. La recherche du potentiel central et des fonctions radiales est menée simultanément, de telle sorte que les équations du champ-self-consistent sont des équations intégrodifférentielles couplées que l'on résout par approximations successives.

Connaissant tous les éléments de matrice du hamiltonien H^T total (1.6) dans la base des fonctions d'onde antisymétriques Φ^A, on recherche une transformation unitaire qui appliquée à cette base de fonctions définit une nouvelle base $|\psi^T>$ dans laquelle la matrice représentant le hamiltonien H^T soit diagonale. Ces fonctions ψ^T sont alors solutions de l'équation de Schrödinger (1.1):

$$H^T|\psi^T> = E\psi^T$$

La projection de cette équation vectorielle sur les vecteurs de la base orthonormée $\{|\Phi^A>\}$, repérés par un indice i, s'écrit :

$$<\Phi_i|H^T|\psi^T> = E<\Phi_i|\psi^T>$$

soit en insérant la relation de fermeture de la base $\{|\Phi^A>\}$

$$\sum_j <\Phi_i|H^T|\Phi_j> <\Phi_j|\psi^T> = E<\Phi_i|\psi^T>$$

posant

$$c_j = <\Phi_j|\psi^T>$$
$$<\Phi_i|H^T|\Phi_j> = H^T_{ij}$$

on obtient

$$\sum H_{ij}c_j = Ec_i$$

où

$$\sum_j (H_{ij} - E\delta_{ij})\, c_j = 0$$

On a donc à résoudre un système linéaire et homogène d'équations dont les inconnues sont les c_j , composantes du vecteur propre suivant les vecteurs de la base $\{|\Phi^A>\}$. Ce système admet une solution autre que la solution triviale (tous les c_j nuls) si, et seulement si, le déterminant des coefficients est nul :

$$\text{Det } |H^T_{ij} - E\delta_{ij}| = 0$$

Les k racines de cette équation séculaire sont les valeurs propres de H^T. A chaque valeur propre E_k correspond un vecteur propre dont les composantes c_{ik} sont déterminées à partir des éléments de matrice H_{ij} et de E_k. La matrice unitaire C du changement de base qui permet de passer de la base des fonctions Φ^A à la base des fonctions ψ^Test formée en juxtaposant les k matrices à une colonne représentant les vecteurs propres. La matrice C est donc formée par l'ensemble des composantes c_{ik} des k vecteurs propres. La matrice C H^T C est diagonale dans la base des vecteurs propres $\{|\psi^T>\}$

Le vecteur propre $|\psi^T_k>$, correspondant à la valeur propre E_k, se développe sur les vecteurs d'état de l'ancienne base suivant :

$$|\psi^T> = \sum_i |\Phi_i><\Phi_i|\psi^T_k> = \sum_i c_{ik}|\Phi_i>$$

les coefficients de ce développement sont les éléments de la matrice C.

2. Approximation champ central : Traitement de la partie radiale

A cause de l'approximative symétrie sphérique du nuage d'électrons, la partie la plus importante du terme d'interaction mutuelle du hamiltonien (1.6) es fonction de r_i seul. A l'approximation d'ordre zéro, chaque électron est alors considéré comme une particule seule se déplaçant dans un potentiel central.

2.1 - Méthode statistique de Thomas et Fermi

Pour rendre compte de l'effet moyen de la répulsion des autres électrons, on cherche un potentiel central tel que :

$$\lim_{r \to o} U(r) = \frac{Ze}{r}$$

$$\lim_{r \to \infty} U(r) = \frac{(Z - N + 1)\, e}{r} \qquad (2.1)$$

Pour des valeurs intermédiaires de r, ce potentiel se met sous la forme :

$$U(r) = \frac{(N - 1)\, e}{r}\ f(r) + \frac{(Z - N + 1)\, e}{r}$$

dans laquelle la fonction f (r) vérifie les conditions aux limites

$f(r) \to 1$ quand $r \to 0$

$f(r) \to 0$ quand $r \geqslant r_0$

où r_0 est un nombre fini ou tend vers l'infini.

L'idée originale développée indépendamment par Thomas (1927) et Fermi (1927) fut de calculer la densité de charge des électrons dans l'atome en appliquant à l'assemblée des électrons, placés dans le champ du noyau et de leur propre distribution de charges, la statistique de Fermi Dirac pour un gaz d'électrons libres. Traitant alors la distribution de charges comme approximativement continue, l'équation de Poisson appliquée à cette densité de charge fournit le potentiel en un point de l'espace. Ce potentiel approché U (r) vérifie donc une équation différentielle, associée aux conditions limites (2.1), dont la solution est obtenue par intégration numérique. Le programme de Eissner et Nussbaumer utilise en fait un potentiel de Thomas Fermi modifié décrit par Gombas (1956). De plus, pour acquérir plus de souplesse dans la recherche du potentiel, ces auteurs introduisent un paramètre d'échelle λ_ℓ de telle sorte que :

$$U(r) = U(r, \lambda_\ell)$$

Ce paramètre ne doit dépendre que de ℓ afin que les fonctions radiales correspondant à la même valeur de ℓ soient calculées dans le même potentiel pour satisfaire la relation d'orthonormalisation (1.10). Ce paramètre d'échelle peut être choisi de deux façons différentes. En faisant varier λ_ℓ on accorde les énergies d'ionisation calculées avec les valeurs observées.

Cette procédure semi empirique, utilisée par Eissner et al (1969), présente un inconvénient majeur : pour reproduire les énergies observées, on peut être amené à modifier les parties radiales de telle sorte que les fonctions d'onde ne soient plus utilisables pour rendre compte des propriétés de l'atome autres que l'énergie. L'autre méthode, qui ne nécessite aucune donnée observationnelle, consiste à faire varier successivement les paramètres λ_ℓ jusqu'à ce qu'un état d'énergie minimum soit atteint pour le système. Cette application du principe variationnel est actuellement utilisée dans le programme de Eissner et Nussbaumer.

On prend donc comme point de départ du calcul, le hamiltonien approché H^c qui représente l'approximation d'ordre zéro :

$$H^c = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\vec{p}_i^2}{2m_e} + U(r_i, \lambda_\ell) \right) = \sum_i h_i^c (r_i, \lambda_\ell) \qquad (2.2)$$

et on traite comme une perturbation la différence :

$$W = H^T - H^c = \sum_{i=1} \left| \xi(r_i)\vec{L}_i.\vec{S}_i - \frac{Z_e^2}{r_i} - U(r_i,\lambda_\ell) \right| + \sum_{i>j=1}^{N} \frac{e^2}{r_{ij}} \qquad (2.3)$$

On introduit ainsi dans l'approximation suivante, d'une part, la contribution restante du potentiel de répulsion qui dépend des angles entre $\vec{r}_i$ et $\vec{r}_j$, d'autre part, les interactions magnétiques.

Pour obtenir les états propres de l'hamiltonien H^c, il suffit de déterminer ceux des hamiltoniens $h^c (r, \lambda_\ell)$

$$h^c (r,\lambda_\ell) = \frac{\vec{p}^2}{2m_e} + U(r,\lambda_\ell) = - \frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta + U(r,\lambda_\ell) \qquad (2.4)$$

les spin orbitales ϕ_a définies en (1.9) sont solutions de l'équation aux valeurs propres :

$$h^c(r,\lambda_\ell)\ \phi_a = \varepsilon_a \phi_a \qquad (2.5)$$

qui conduit à l'équation radiale :

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - U(r,\lambda_\ell) + \varepsilon_{n\ell} \right] P_{n\ell}(r) = 0 \qquad (2.6)$$

avec les conditions aux limites

$$P_{n_\ell}(0) = P_{n_\ell}(\infty) = 0 \qquad (2.7)$$

La condition, que le nombre de noeuds de la fonction radiale, sans compter r = o, doit être n-ℓ-1, détermine la valeur propre $\varepsilon_{n\ell}$, énergie de tout électron ayant les valeurs $n\ell$ dans l'ensemble a de nombres quantiques qui caractérise son état. L'énergie de l'atome dans un état non perturbé ne dépend que de la distribution des électrons entre les couches . La liste des valeurs $n\ell$ des ensembles individuels a spécifie la configuration de l'atome qui est,par conséquent,fortement dégénérée.

Les techniques d'intégration numérique de l'équation radiale (2.6) sont exposées dans Hartree (1957). La solution est normalisée

$$\int_0^\infty P_{n\ell}^2 (r)dr = 1$$

et comme toutes les fonctions $P_{n\ell}(r)$, pour une valeur donnée de ℓ, sont calculées dans le même potentiel central, les spin orbitales ϕ_a forment une base orthonormée de fonctions d'onde satisfaisant (1.10).

2.2. - Méthode "self consistante" de Hartree Fock

Cette méthode est une application du principe variationnel, c'est à dire qu'on cherche les fonctions ψ qui rendent la valeur moyenne de l'opérateur hamiltonien stationnaire

$$< H> = \frac{\int \psi^* H \psi \, d\tau}{\int |\psi|^2 \, d\tau} \qquad (2.8)$$

si $\Delta <H> = 0$ au premier ordre en $\Delta \psi$ pour toute variation $\Delta \psi$, alors ψ est une solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps

$$H \psi_n = E_n \psi_n$$

et $< H>$ est la valeur correspondante de l'énergie E_n pour cet état stationnaire.

La fonction d'essai Hartree Fock est une fonction antisymétrique définie en (1.8), construite à partir de "spins orbitales" ϕ_a de type champ central (1.9).

On calcule pour ces fonctions d'essai, la valeur moyenne du hamiltonien électrostatique (1.2) que l'on peut exprimer sous la forme:

$$H_{\text{électrostatique}} = \sum_{i=1}^{N} f_i + \sum_{i>j=1}^{N} g_{ij} \tag{2.9}$$

où f_i est un opérateur agissant sur les coordonnées d'un seul électron

$$f_i = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_i - \frac{Ze^2}{r_i} \tag{2.10}$$

et g_{ij} est un opérateur agissant sur les coordonnées de deux électrons:

$$g_{ij} = \frac{e^2}{r_{ij}} = \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \tag{2.11}$$

L'orthonormalisation des spins orbitales assure que les éléments diagonaux du hamiltonien électrostatique seront donnés par la somme des éléments diagonaux des opérateurs $\sum_i f_i$ et $\sum_{i>j} g_{ij}$. Les éléments de matrice de tels opérateurs reliant des états antisymétriques dont les fonctions propres sont données par (1.8), sont explicités dans T.A.S. (p. 169). En particulier, les éléments diagonaux ont la forme :

$$\langle \Phi^A \mid \sum_{i=1}^{N} f_i \mid \Phi^A \rangle = \sum_{i=1}^{N} \langle \phi_a(i) \mid f_i \mid \phi_a(i) \rangle \tag{2.12}$$

$$\langle \Phi^A \mid \sum_{i>j=1}^{N} g_{ij} \mid \Phi^A \rangle$$

$$= \sum_{i>j=1}^{N} \langle \phi_a(i)\, \phi_b(j) \mid g_{ij} \mid \phi_a(i)\, \phi_b(j) \rangle - \langle \phi_a(i) \phi_b(j) \mid g_{ij} \mid \phi_a(j) \phi_b(i) \rangle \tag{2.13}$$

Le fait, d'une part, que les opérateurs f_i et g_{ij} n'agissent que sur les fonctions d'espace des spins orbitales, et d'autre part, que ces spins orbitales soient choisies de type champ central, permet d'exprimer ces éléments de matrice en termes de fonctions radiales :

$$I(n\ell, n\ell) = \langle \phi_a(i) \mid f_i \mid \phi_a(i) \rangle = \int_0^\infty P_{n\ell}(r_i) \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_i - \frac{Ze^2}{r_i} \right) P_{n\ell}(r_i\, dr_i) \tag{2.14}$$

$$J(a,b) = \langle \phi_a(i)\phi_b(j) \; |g_{ij}| \phi_a(i)\phi_b(j) \rangle = \sum_{k=0}^{\infty} a^k(\ell^a m^a, \ell^b m^b) \; F^k(n^a \ell^a, n^b \ell^b) \quad (2.15)$$

$$K(a,b) = \langle \phi_a(i)\phi_b(j) \; |g_{ij}| \phi_a(j)\phi_b(i) \rangle = \sum_{k=0}^{\infty} b^k(\ell^a m^a, \ell^b m^b) G^k(n^a \ell^a, n^b \ell^b) \quad (2.16)$$

J (a,b) et K (a,b) sont respectivement l'intégrale directe et l'intégrale d'échange que l'on obtient en développant le terme d'interaction électrostatique en série de polynomes de Legendre.

$$\frac{1}{r_{ij}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{r_<^k}{r_>^{k+1}} P_k(\cos\omega) \quad (2.17)$$

où $r_<$ et $r_>$ désignent respectivement la plus petite et la plus grande des distances r_i, r_j et ω l'angle entre les directions $\vec{r}_i$, $\vec{r}_j$.

Cette expression (2.17) permet de séparer les parties radiales des parties angulaires dans les intégrales J (a,b) et K (a,b) et, par conséquent, de donner ces intégrales en fonction d'intégrales radiales F^k et G^k indépendantes de m_ℓ, m_s :

$$F^k(n^a \ell^a, n^b \ell^b) = e^2 \int_0^\infty \int_0^\infty |P_{n^a \ell^a}(r_i)|^2 \frac{r_<^k}{r_>^{k+1}} |P_{n^b \ell^b}(r_j)|^2 \, dr_i dr_j \quad (2.18)$$

$$G^k(n^a \ell^a, n^b \ell^b) = e^2 \int_0^\infty \int_0^\infty P_{n^a \ell^a}(r_i) \, P_{n^b \ell^b}(r_j) \, \frac{r_<^k}{r_>^{k+1}} \, P_{n^a \ell^a}(r_j) \, P_{n^b \ell^b}(r_i) \, dr_i \, dr_j \quad (2.19)$$

l'intégrale directe exprime l'interaction électrostatique entre deux densités de charges localisées aux points r_i et r_j . L'intégrale d'échange n'a pas d'interprétation classique et n'est différente de zéro que si les fonctions d'onde ϕ_a et ϕ_b représentent des électrons de même spin. Pour une valeur de k donné, l'intégrale d'échange est beaucoup plus petite que l'intégrale directe; ceci est évident sur les expressions (2.18) et (2.19) en comparant les produits $|P_{n^a \ell^a}(r_i)|^2$ et $P_{n^a \ell^a}(r_i) \, P_{n^b \ell^b}(r_i)$.

Plus les nombres quantiques n^a et n^b diffèrent, moins les fonctions radiales $P_{n^a\ell^a}(r_i)$ et $P_{n^b\ell^b}(r_i)$ se recouvrent. Les coefficients a^k et b^k des expressions (2.18) et (2.19) sont des produits d'intégrales définies de polynômes de Laguerre associés tabulés dans T.A.S. (P. 180).

La valeur moyenne du hamiltonien s'exprime donc par :

$$E^{AA} = \langle \Phi^A | H_{\text{électrostatique}} | \Phi^A \rangle = \sum_{i=1}^{N} I(n\ell,n\ell) + \sum_{i>j=1}^{N} J(a,b) - K(a,b) \quad (2.20)$$

Pour obtenir les équations de Hartree Fock, on fait varier chaque fonction radiale $P_{n\ell}(r_i)$ indépendamment pour minimiser l'énergie moyenne E^{AA} en maintenant la condition de normalisation (1.10) des $P_{n\ell}(r_i)$. La méthode des multiplicateurs de Lagrange permet de tenir compte de cette condition supplémentaire. L'équation différentielle vérifiée par chaque fonction radiale $P_{n\ell}(r)$ est alors de la forme :

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{d^2}{dr^2} - \frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + \frac{Ze^2}{r} - \frac{1}{r}Y(r) - \varepsilon_{n\ell,n\ell}\right] P_{n\ell}(r) =$$

$$= \frac{1}{r}\chi(r) + \sum_{n'\neq n} \varepsilon_{n\ell n'\ell} P_{n'\ell}(r) \quad (2.21)$$

avec les conditions aux limites

$$P_{n\ell}(0) = P_{n\ell}(\infty) = 0$$

Les fonctions Y (r) et X (r) s'expriment en fonction d'intégrales $Y^k(n\ell, n'\ell'; r)$ définies dans Hartree (1957) (p. 50) par :

$$\frac{1}{r_i} Y^k(n\ell, n'\ell'; r_i) = \int_0^\infty \frac{r_<^k}{r_>^{k+1}} P_{n\ell}(r_j) P_{n'\ell'}(r_j)\, dr_j \quad (2.22)$$

Au lieu de simples équations différentielles telles que (2.6) obtenues dans la méthode Thomas Fermi, on aboutit ici à un ensemble d'équations intégrodifférentielles couplées par l'intermédiaire des fonctions Y^k. Dans cette méthode Hartree Fock, on ne choisit pas , a priori, une forme pour le potentiel central, mais on le détermine par approximations successives en résolvant le système d'équations (2.21). En ce sens, cette méthode est cohérente (ou "self consistente") puisqu'on calcule le potentiel en utilisant des fonctions radiales qui sont déterminées à partir de ce potentiel. En particulier, puisque les fonctions d'onde d'essai choisies sont de type champ central, le potentiel obtenu ne peut être qu'un potentiel central. Les fonctions d'onde obtenues sont donc comme dans la méthode de Thomas Fermi, fonctions propres d'un hamiltonien champ central H^c.

3. Approximation champ central : Traitement de la partie angulaire différentes sortes de couplage.

Une configuration ne comprenant que des couches complètes est bien représentée par une fonction d'onde antisymétrique Φ^A , l'état A comprenant toutes les valeurs possibles de nombres quantiques m_ℓ, m_s associés à une valeur de $(n\ell)$ donnée. Pour représenter une configuration qui comprend des couches incomplètes, il est nécessaire de prendre une combinaison linéaire de déterminants tels que (1.8), chacun correspondant à un choix différent de spin orbitales occupées dans cette configuration.

Pour calculer les éléments de matrice du hamiltonien total, on a intérêt à choisir la combinaison linéaire normée de déterminants, c'est à dire, la base de fonctions d'onde qui soit bien adaptée aux symétries du hamiltonien total. Le choix des coefficients de la combinaison linéaire est intimement lié au mode de couplage des moments angulaires des électrons.

3.1 - Différents types de couplage

Le type de couplage caractérise l'importance relative des interactions électrostatiques et magnétiques qui interviennent dans le hamiltonien total.

Le couplage Russel Saunders ou couplage LS provient de la prédominance des interactions électrostatiques sur les interactions magnétiques. Les niveaux les plus bas des atomes légers et de masse atomi- moyenne le vérifient.

Dans ce couplage, on suppose que tous les éléments orbitaux $\vec{L}_i$ sont couplés pour donner un moment orbital total $\vec{L}$

$$\vec{L} = \sum_{i=1}^{N} \vec{L}_i$$

et que, de même, les spins $\vec{S}_i$ sont couplés pour donner un spin résultant $\vec{S}$:

$$\vec{S} = \sum_{i=1}^{N} \vec{S}_i$$

On suppose ensuite qu'un couplage plus faible entre le moment orbital $\vec{L}$ et le spin $\vec{S}$, donne le moment cinétique total de l'atome :

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

L'autre cas extrême de couplage ou couplage jj se produit lorsque les interactions magnétiques entre $\vec{L}_i$ et $\vec{S}_i$ sont grandes devant la partie angulaire des interactions électrostatiques. Ce type de couplage est beaucoup moins fréquent que le couplage LS,et est restreint à un certain type de configurations que l'on trouve pour les niveaux élevés des atomes lourds. Dans ce couplage, le moment orbital $\vec{L}_i$ et le spin $\vec{S}_i$ de chaque électron sont couplés pour donner un moment cinétique $\vec{J}_i$:

$$\vec{J}_i = \vec{L}_i + \vec{S}_i$$

puis les forces électrostatiques plus faibles couplent les différents $\vec{J}_i$ pour donner un moment cinétique résultant $\vec{J}$

$$\vec{J} = \sum_{i=1}^{N} \vec{J}_i$$

En fait, pour beaucoup d'atomes et d'ions d'intérêt astrophysique, les deux interactions sont du même ordre: c'est le couplage intermédiaire dans lequel on couple les moments $\vec{L}$ et $\vec{S}$, comme dans le couplage Russel Saunders.

3.2 - Choix de la base suivant le type de couplage

Dans l'approximation où l'on néglige les éléments de matrice du hamiltonien qui relient des états appartenant à différentes configurations, les états d'énergie de l'atome pourront être caractérisés précisement par la configuration τ . Dans cette approximation, on choisit une base qui diagonalise les interactions prédominantes suivant le type de couplage.

a) En couplage LS pur, le hamiltonien total est le hamiltonien électrostatique. Il commute avec toutes les composantes du moment orbital total $\vec{L}$ et du moment angulaire $\vec{S}$ et, par conséquent, avec toutes les composantes du moment angulaire total $\vec{J}$. On utilise, soit l'ensemble des observables SLM_SM_L ou l'ensemble SLJM pour caractériser les états d'énergie de l'atome. M_S, M_L, M sont respectivement les projections suivant l'axe de quantification Oz des moments $\vec{L}$, $\vec{S}$, $\vec{J}$.
Suivant la représentation choisie, la fonction d'onde de l'atome sera $\psi(\tau SLM_SM_L)$ fonction propre commune de H, S^2, L^2, S_z, L_z ou $\psi(\tau SLJM)$ fonction propre commune de H, S^2, L^2, J^2, J_z.

En représentation SLM_SM_L, les fonctions d'onde sont donc des combinaisons linéaires de déterminants de Slater qui ne diffèrent que par les nombres quantiques M_L, M_S des couches incomplètes:

$$\psi(\tau SLM_SM_L) = \sum_{m_\ell m_s} C^{\ell_1 s_1 \ell_2 s_2 \ldots\ldots\ldots, LS}_{m_{\ell_1} m_{s_1} m_{\ell_2} m_{s_2} \ldots\ldots, M_L M_S} \Phi^A_\tau(M_S, M_L) \quad (3.1)$$

$\Phi^A_\tau(M_S, M_L)$ désigne les déterminants de Slater de la configuration qui correspondent à la même valeur de

$$M_S = \sum_{i=1}^{N} m_{s_i} \text{ et de } M_L = \sum_{i=1}^{N} m_{\ell_i} \text{ et } C^{\ell_1 s_1 \ldots\ldots, LS}_{m_{\ell_1} m_{s_1} \ldots, M_L M_S}$$

est un coefficient de couplage vectoriel que l'on obtient; soit en diagonalisant les matrices S^2 et L^2 calculées dans la représentation $\Phi^A_\tau(M_S, M_L)$, soit en appliquant le principe variationnel en cherchant les valeurs des coefficients de la combinaison linéaire (3.1.) qui rendent :

$$\frac{\langle \psi(\tau SLM_SM_L) | H_{\text{électrostatique}} | \psi(\tau SLM_SM_L) \rangle}{\langle \psi(\tau SLM_SM_L | \psi(\tau SLM_SM_L \rangle} \text{ stationnaire}$$

On impose une condition supplémentaire sur ces coefficients pour que la base $\psi(\tau\ S\ L\ M_S\ M_L)$ soit normée.

Dans la représentation S L M_S M_L, l'énergie est indépendante de M_S et M_L, les fonctions sont caractérisées par les nombres quantiques L et S, c'est à dire par la donnée du multiplet.

Dans ce cas, une fois que l'on a trouvé les fonctions d'onde qui diagonalisent les opérateurs L^2 et S^2, le problème de la résolution de l'équation de Schrödinger est résolu, les énergies des différents termes (états de L et S définis) sont les éléments diagonaux du hamiltonien dans cette base.

Dans la base ψ (τ S L M_S M_L) les seuls éléments non nuls du hamiltonien électrostatique sont donc :

$$\langle \psi(\tau SLM_SM_L) | H_{\text{électrostatique}} | \psi(\tau' SLM_SM_L) \rangle \qquad (3.2)$$

$$= \sum_{\substack{m_\ell m_s \\ m'_\ell m'_s}} C^{\ell_1 s_1 \ldots\ldots, LS}_{m_{\ell_1} m_{s_1} \ldots, M_L M_S} \; C^{\ell'_1 s'_1 \ldots\ldots, L\ S}_{m'_{\ell_1} m'_{s_1} \ldots, M_L M_S} \langle \Phi^A_\tau(M_SM_L) | H_{\text{électrostatique}} | \Phi^B_\tau(M_SM_L) \rangle$$

- $\ell_i s_i m_{\ell_i} m_{s_i}$ se rapportent à l'état A de la configuration

- $\ell_i s_i m'_{\ell_i} m'_{s_i}$ se rapportent à l'état B de la même configuration caractérisés par les mêmes valeurs de M_S M_L que l'état A.

On doit donc calculer les éléments de matrice du hamiltonien entre états non perturbés de l'approximation champ central :

$$\langle \Phi^A_\tau(M_SM_L) | H_{\text{électrostatique}} | \Phi^B_\tau(M_SM_L) \rangle$$

$$= \langle \Phi^A_\tau(M_SM_L) \Big| \sum_{i=1}^{N} f_i \Big| \Phi^B_\tau(M_SM_L) \rangle + \langle \Phi^A_\tau(M_SM_L) \Big| \sum_{i>j=1}^{N} g_{ij} \Big| \Phi^B_\tau(M_SM_L) \rangle \qquad (3.3)$$

L'opérateur f_i, défini en (2.10), n'a d'éléments de matrice différents de zéro, que si les deux états ordonnés A et B ne diffèrent que au plus par un ensemble individuel de nombres quantiques ($n\ \ell\ m_\ell\ m_s$). Cet opérateur n'agissant pas dans l'espace des moments orbitaux et des spins, n'a donc que des éléments entre états ne différant que par la valeur de n :

$$\langle \Phi^A_\tau(M_SM_L) \Big| \sum_{i=1}^{N} f_i \Big| \Phi^B_\tau(M_SM_L) \rangle$$

$$= \pm \langle \phi_{n^a \ell^a m_\ell^a m_s^a} \Big| f_i \Big| \phi_{n^a \ell^a m_\ell^a m_s^a} \rangle = I(n^a\ell^a, n^b\ell^b) \qquad (3.4)$$

ou entre états indentiques :

$$\langle \Phi^A(M_SM_L) \Big| \sum_{i=1}^{N} f_i \Big| \Phi^A_\tau(M_SM_L) \rangle = \sum_{i=1}^{N} I(n^a\ell^a, n^a\ell^a) \qquad (3.5)$$

L'opérateur d'interaction électrostatique g_{ij} défini en (2.11) n'a d'éléments de matrice non nuls que si les deux états A et B ne diffèrent au plus que par deux ensembles individuels $n\ell\ m_\ell m_s$. Les éléments de matrice de cet opérateur ont la forme générale donnée dans T.A.S. (P.173) :

$$< \Phi^A_\tau(M_S M_L) \mid \sum_{i\ j=1}^{N} g_{ij} \mid \Phi^B_\tau(M_S M_L) > \qquad (3.6)$$

$$= \pm \left[<\phi_a(i)\ \phi_b(j)|\ g_{ij}|\ \phi_c(i)\ \phi_d(j)> - <\phi_a(i)\ \phi_b(j)|\ g_{ij}|\ \phi_c(j)\ \phi_d(i)> \right]$$

En procédant comme dans le § (2.2), on obtient l'expression :

$$<\phi_a(i)\ \phi_b(j) \mid g_{ij} \mid \phi_c(i)\ \phi_d(j)>$$

$$= \delta(m_s^a, m_s^c)\ \delta(m_s^b, m_s^d)\ \ \delta(m_\ell^a + m_\ell^b, m_\ell^c + m_\ell^d) \qquad (3.7)$$

$$\times \sum_{k=0}^{\infty} c^k(\ell^a m_\ell^a, \ell^c m_\ell^c)\ c^k(\ell^b m_\ell^b, \ell^d m_\ell^d)\ R^k(n^a\ell^a n^b\ell^b,\ n^c\ell^c n^d\ell^d)$$

L'intégrale de Slater R^k, forme générale des intégrales radiales F^k et G^k définies en (2.18) et (2.19), a pour expression :

$$R^k(n^a\ell^a n^b, \ell n^c\ell^c n^d\ell^d)$$

$$= e^2 \int_0^\infty\int_0^\infty P_{n^a\ell}\ a(r_i) P_{n^b\ell^b}\ (r_j)\ \ \frac{r_<^k}{r_>^{k+1}}\ P_{n^c\ell^c}(r_i)\ P_{n^d\ell^d}(r_j)\ dr_i dr_j \qquad (3.8)$$

Les coefficients c^k sont des intégrales définies de trois polynômes de Laguerre associés et sont tabulés dans T.A.S. (P. 178).

Les fonctions delta dans l'expression (3.7) traduisent le fait que l'opérateur d'interaction électrostatique n'agit pas dans l'espace des spins et n'affecte pas la composante z du moment orbital total.

L'interaction électrostatique est différente pour tous les états de la même configuration puisque cette quantité a des éléments de matrice qui relient des états de m_ℓ^a, m_ℓ^b, m_ℓ^c, m_ℓ^d différents, pourvu que $m_\ell^a + m_\ell^b = m_\ell^c + m_\ell^d$. Elle sert donc, en partie, à lever la dégénérescence des états appartenant à la même configuration, qui existe dans l'approximation à l'ordre zéro du modèle à champ central. L'interaction électrostatique divise la configuration en termes séparés, chacun étant caractérisé par une valeur de L et S. Il subsiste une dégénérescence des états, due au fait, déjà signalé, que l'énergie est indépendante des valeurs de M_L et M_S.

Pour les couches incomplètes, l'équation radiale a la même forme qu'en (2.21), mais les coefficients qui interviennent dans les fonctions Y (r) et X (r) dépendent des termes de la configuration .

En représentation S L J M , la fonction d'onde de l'atome s'écrit :

$$\psi(\tau SLJM) = \sum_{M_L M_S} C^{S\,L,\,J}_{M_S M_L, M}\, \psi(\tau SLM_S M_L) \qquad (3.9)$$

où $C^{S\,L\,,\,J}_{M_S\,M_L\,,M}$ est un coefficient algébrique de Clebsch-Gordan tabulé dans T.A.S. L'ordre SLJ est l'ordre standard de couplage. Comme un état $|\tau S\ L\ J\ M\rangle$ est une combinaison linéaire d'états $|\tau\ S\ L\ M_S\ M_L\rangle$ avec les mêmes valeurs de S et L, l'énergie dans la représentation S L J M est indépendante de J et M en couplage LS pur. En couplage LS, l'interaction magnétique qui couple les moments $\vec{L}$ et $\vec{S}$ pour donner le moment total $\vec{J}$, étant toujours petite devant l'interaction électrostatique, on ne considère que les éléments diagonaux de l'opérateur spin orbite dans la base des états $\psi(\alpha\ S\ L\ M_S\ M_L)$.

Un terme donné se divisera sous l'effet de l'interaction spin orbite en un groupe de niveaux voisins, caractérisés par une valeur de S et L avec une bonne approximation, et distingués par différentes valeurs de J. C'est le cas de l'ion OV.

b) En couplage intermédiaire, le hamiltonien total comprend l'interaction spin orbite et par conséquent, ne commute plus avec L^2 et S^2 mais seulement avec J^2. Le hamiltonien d'interaction spin orbite a alors des éléments de matrice non diagonaux dans la représentation (S L J M) qui mélangent des états caractérisés par des valeurs de L et S différentes mais de même valeur de J. Ces éléments non diagonaux sont responsables de la non-validité de la caractérisation par S et L, seule la caractérisation par J a un sens. C'est le cas d'ions de poids atomique Z moyen et fortement ionisés comme Fe X. La base des fonctions d'onde est alors constituée de fonctions propres communes à H, J^2 , J_z :

$$\psi(\tau JM) = \sum_{S_i L_i} a_i \, \psi(\tau S_i L_i JM) \qquad (3.10)$$

Les coefficients a_i de cette combinaison linéaire dépendent de l'atome et sont obtenus en diagonalisant l'interaction spin orbite calculée dans la représentation (S L J M).

En couplage intermédiaire, on doit donc calculer les éléments de matrice du hamiltonien total en représentation S L J M . Dans cette représentation, le hamiltonien électrostatique est, d'après le paragraphe précédent, complètement diagonal.

Le hamiltonien magnétique défini en (1.5) n'a d'éléments de matrice qu'entre états caractérisés par une même valeur de J et M, éléments que l'on calcule à partir des éléments de matrice de l'opérateur f_i (s.o) entre deux spins orbitales explicités dans T.A.S. (p. 121) :

$$\langle \phi_a(i) \, | f_i(s.o) | \, \phi_b(i) \rangle \qquad (3.11)$$

$$= \frac{1}{\hbar^2} \, \delta(\ell^a, \ell^b) \, \langle \ell^a \, m_\ell^a \, m_s^a \, | \, \vec{L}_i . \vec{S}_i | \, \ell^b m_\ell^b \, m_s^b \rangle \, \zeta(n^a \ell^a, n^b \ell^b)$$

Dans l'expression (3.11) le premier facteur montre que la matrice de l'opérateur spin orbite est rigoureusement diagonale en ℓ, le deuxième facteur représente l'intégration sur les angles :

$$<\ell^a m_\ell^a m_s^a \mid \vec{L}_i.\vec{S}_i \mid \ell^b m_\ell^b m_s^b > \qquad (3.12)$$

$$= \hbar^2 \, \delta(\ell^a m_\ell^a + m_s^a, \ell^b m_\ell^b + m_s^b)$$

$$\times \left| \delta(m_s^a, m_s^b) \, m_\ell^a m_s^a + \frac{1}{2} \, \delta(m_s^b, m_s^a \pm 1) \sqrt{(\ell^a - m_\ell^a - m_s^a + \frac{1}{2})(\ell^a + m_\ell^a + m_s^a + \frac{1}{2})} \right.$$

Le troisième facteur ou paramètre de spin orbite ζ $(n^a \, l^a, \, n^b \ell^b)$ correspond à la partie radiale :

$$\zeta(n^a \ell^a, \, n^b \ell^b) = \hbar^2 \int_0^\infty P_{n^a \ell^a}(r_i) \;\; \xi(r_i) \; P_{n^b \ell^b}(r_i) \; dr_i \qquad (3.13)$$

A l'intérieur d'une configuration τ ce paramètre de spin orbite a donc la forme particulière :

$$\zeta(n^a \ell^a, \, n^a \ell^a) = \hbar^2 \int_0^\infty P^2_{n^a \ell^a}(r_i) \;\; \xi(r_i) \; dr_i \qquad (3.14)$$

c) En couplage jj, le hamiltonien total ne comprend pas l'interaction électrostatique. Le hamiltonien spin orbite commute avec le moment cinétique total de chaque électron $\vec{j}_i$. La matrice qui le représente est donc diagonale dans la base $\{ \mid n_i \, l_i \, j_i \, m_i > \}$ à l'intérieur d'une configuration τ.
L'élément diagonal du hamiltonien spin orbite dans cette représentation n ℓ j m est donné par :

$$\sum_{i=1}^{N} < n_i \ell_i j_i m_i \mid f_i(s.o) \mid n_i \ell_i j_i m_i >$$

$$= \sum_i \zeta(n_i \ell_i, \, n_i \ell_i) \; \frac{j_i(j_i+1) - \ell_i(\ell_i+1) - s_i(s_i+1)}{2} \qquad (3.15)$$

il ne dépend que des valeurs $n_i \; \ell_i \; j_i$.

On détermine ensuite l'effet de l'addition d'une interaction électrostatique, suffisamment petite pour être considérée comme une perturbation, sur les niveaux dégénérés donnés par l'interaction spin orbite.

3.3 - Ordre de grandeur des différentes interactions

L'examen du cas particulier d'un potentiel central coulombien $U(r) = +\frac{Ze}{r}$ permet de comprendre comment évolue la compétitivité des interactions électrostatiques et magnétiques, et par conséquent, de savoir quel type de couplage vérifie l'atome étudié.

Dans ce cas, les spins orbitales sont fonctions propres du hamiltonien hydrogénoïde :

$$H^o = \sum_{i=1}^{N} \{ \frac{p_i^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{r_i} \}$$

Les fonctions radiales $P_{n\ell}(r)$ sont analytiques et les valeurs moyennes de puissances de r sont données dans T.A.S. (p.117).

L'interaction des électrons avec le noyau est :

$$\langle \Phi^A \mid \sum_{i=1}^{N} \frac{Ze^2}{r_i} \mid \Phi^A \rangle = \sum_{i=1}^{N} Z^2 \frac{e^2}{a_o} \frac{1}{n_i^2} \qquad (3.16)$$

avec

$a_o = \frac{h^2}{m\ell^2}$, rayon de l'atome de Bohr.

Dans l'élément diagonal du hamiltonien d'interaction électrostatique, la plus forte contribution est fournie par l'intégrale directe $F^k(n^a l^a, n^b l^b)$ dont la variation avec Z peut être évaluée à partir des fonctions d'ondes hydrogénoïdes comme :

$$F^k(n^a\ell^a, n^b\ell^b) = e^2 \int_0^\infty r_1^k P_1^2(n^a\ell^a)\, dr_1 \int_0^\infty r_2^{-(k+1)} P_2^2(n^b\ell^b) dr_2$$

$$F^k(n^a\ell^a, n^b\ell^b) \sim e^2 \frac{a_o^k}{Z^k} \times \frac{a^{-(k+1)}}{Z^{-(k+1)}} = \frac{e^2}{a_o} Z \qquad (3.17)$$

Il y a ainsi $N\frac{(N-1)}{2}$ termes variant comme $\frac{Ze^2}{a_o}$. Pour des atomes de Z élevé possédant un nombre fini d'électrons, c'est-à-dire des atomes fortement ionisés, la répulsion coulombienne entre les électrons est largement dominée par l'attraction nucléaire et le terme d'interaction électrostatique peut être traité comme une perturbation du hamiltonien hydrogénoïde H^o.

Dans un potentiel central coulombien, le hamiltonien d'interaction spin orbite s'écrit d'après (1.4) :

$$f_i(s.o) = \frac{1}{2} \frac{Ze^2}{m_e^2 c^2} \frac{1}{r_i^3} \vec{L}_i.\vec{S}_i \qquad (3.18)$$

L'élément diagonal de ce hamiltonien suivant (3.11) est :

$$\langle \Phi^A_\tau \mid \sum_{i=1}^{N} f_i(s.o) \mid \Phi^A_\tau \rangle$$

$$= \sum_{i=1}^{N} \frac{Ze^2}{2m_e^2 c^2} \beta(\ell_i m_{\ell_i} m_{s_i}) \int_0^\infty \frac{1}{r_i^3} P^2_{n_i \ell_i}(r_i) dr_i \qquad (3.19)$$

$\beta(\ell_i\ m_{\ell_i}\ m_{s_i})$ symbolise le coefficient angulaire donné par (3.12)

d'où

$$\langle \Phi^A \mid \sum_{i=1}^{N} f_i(s.o) \mid \Phi^A \rangle = \sum_{i=1}^{N} Z^4 \alpha^2 \frac{e^2}{2a_o} \frac{\beta(\ell_i m_{\ell_i} m_{s_i})}{n_i^3 \ell_i (\ell_i+1)(\ell_i+2)} \qquad (3.20)$$

$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$ est la constante de structure fine.

La comparaison des expressions (3.17) et (3.20) montre que plus Z augmente le long d'une séquence isoélectronique, plus l'interaction spin orbite devient prépondérante.

Dans le hamiltonien total, il y a N termes dus à l'interaction spin orbite variant comme $Z^4 \alpha^2 \frac{e^2}{a_0}$ d'après (3.20) et $\frac{1}{2}$ N (N-1) termes dus à l'interaction mutuelle des électrons variant comme $Z \frac{e^2}{a_0}$ d'après (3.17). Le rapport de ces termes varie donc comme $\frac{Z}{N-1} Z^2 \alpha^2$ ce qui permet de prévoir que plus l'atome est ionisé (Z > N) plus l'interaction spin orbite devient rapidement prépondérante quand Z augmente.

Ces estimations ne permettent cependant pas de donner de règles générales, quant à l'importance relative des termes du hamiltonien total. La charge du noyau Z et le nombre d'électrons N intervenant concurentiellement, chaque atome est un cas particulier.

4 . Introduction de l'interaction de configurations

L'approximation fondamentale, faite jusqu'à présent, est l'adoption d'une fonction d'onde approchée décrivant une seule configuration τ de l'atome. Dans cette approximation, les éléments de matrice du hamiltonien total reliant des états appartenant à des configurations différentes sont négligés et les fonctions propres que l'on obtient, en diagonalisant les interactions prédominantes, sont des combinaisons linéaires de fonction d'onde associées à une configuration bien définie. Or, le hamiltonien d'interaction électrostatique et le hamiltonien d'interaction spin orbite possèdent des éléments de matrice reliant des états appartenant à différentes configurations.

Si l'on tient compte de ces éléments non diagonaux, lors de la diagonalisation du hamiltonien total, la fonction propre de ce hamiltonien devient une combinaison linéaire de fonctions d'onde associées à différentes configurations :

$$\psi^T(SL) = \sum_j c_j \psi(\tau_j SL) \qquad \text{en couplage LS} \quad (4.1)$$

$$\psi^T(J) = \sum_j c_j \psi(\tau_j J) \qquad \text{en couplage intermediaire} \quad (4.2)$$

Dans cette superposition de configurations, apparaît une propriété importante du hamiltonien atomique : H^T commute avec l'opérateur parité (TAS p185) et n'a donc d'éléments de matrice qu'entre configurations de même parité. La parité d'une configuration est donnée par la parité de $\sum_i \ell_i$, la somme étant étendue à tous les nombres quantiques ℓ_i figurant dans la configuration. Par conséquent, l'interaction des configurations ne peut mélanger que des configurations de même parité, et que des niveaux caractérisés par la même valeur de L et S en couplage LS, ou par la même valeur de J en couplage intermédiaire.

Dans l'approximation champ central, que ce soit dans le modèle statistique de l'atome de Thomas et Fermi ou dans le modèle de Hartree Fock, l'effet de l'interaction mutuelle des électrons est moyenné afin d'obtenir des spins orbitales de type champ central; la façon détaillée dont les mouvements des électrons sont corrélés n'est alors pas complètement considérée. En effet, l'interaction électrostatique entre deux électrons dépend non seulement des distances r_1 et r_2, mais aussi de l'angle ω entre les vecteurs $\vec{r}_1$ et $\vec{r}_2$, en faisant une moyenne sphérique, on perd la dépendance avec l'angle ω de cette interaction. La façon la plus directe de tenir compte de ces corrélations est d'introduire explicitement l'angle ω dans la fonction d'onde. Le nombre de distances interélectroniques $\frac{1}{2} N (N-1)$ augmentant très rapidement avec le nombre d'électrons, cette méthode n'est applicable qu'à des atomes comportant peu d'électrons ; elle n'a été effectivement développée que pour des atomes à deux électrons. Les calculs les plus précis ont été faits pour l'hélium par Shiff and Pekeris (1964) qui introduisent explicitement la distance r_{12} dans l'expression des spins orbitales. La méthode de l'interaction de configurations constitue une autre façon, quoique moins directe, de calculer ces effets de corrélation et par conséquent, d'améliorer les fonctions d'onde.

5. Importance de l'interaction de configurations. Conditions limites d'utilisation des divers programmes existants.

La contamination d'un état caractérisé par une configuration τ par des états appartenant à d'autres configurations τ_j selon (4.1) et (4.2), est d'autant plus importante que le couplage induit par l'interaction électrostatique ou l'interaction spin orbite entre ces états est plus fort, et que le niveau perturbateur est plus proche du niveau excité. Dans le cas où plusieurs niveaux de même LS ou de même J appartenant à différentes configurations de même parité se trouvent très proches les uns des autres, l'interaction de configurations peut devenir importante; la notion de configuration attachée à un niveau perd son sens, chacun de ces niveaux doit être interprété comme un mélange des configurations qui interagissent. On désigne néanmoins le niveau par la configuration ayant le plus fort coefficient dans les développements (4.1) et (4.2).

Dans le cas où les éléments non diagonaux du hamiltonien total sont petits, un niveau de l'atome est alors représenté avec une bonne approximation par une configuration , et il est alors suffisant de résoudre le problème de l'interaction de configuration par la méthode des perturbations au second ordre. Sur le développement de l'énergie d'un niveau au deuxième ordre de la théorie des perturbations stationnaires, il apparaît clairement que l'effet de ces éléments non diagonaux est d'éloigner l'un de l'autre les deux niveaux qui interagissent.

Ainsi, il peut arriver que lorsque deux configurations ont une forte interaction électrostatique,l'ordre des termes soit inversé par rapport à celui donné par une approximation au premier ordre de l'énergie. Par exemple, l'interaction des configurations 2s3p et 2p3s dans OV est responsable du fait que dans la configuration 2s3p, le terme ^1P se trouve au-dessous du terme ^3P, ce qui est en contradiction avec la règle générale empirique de Hund,et le résultat théorique au premier ordre,selon lequel,le terme triplet est le plus bas dans toutes les configurations sl. Le développement de la fonction d'onde ψ $(2s3p\,^1P)$ met en évidence la contribution du niveau $2p3s\,^1P$

$$\psi^T(2s3p\ ^1P) = 0.94\ \psi(2s3p\ ^1P) - 0.31\ \psi(2p3s\ ^1S) + 0.08\ \psi(2p3d\ ^1P) + 0.016\ \psi(2s2p\,^1P)$$

alors que pour le niveau $2s3p\,^3P$ l'interaction de configuration est moins importante :

$$\psi^T(2s3p\ ^3P) = 0.99\ \psi(2s3p\ ^3P) + 0.11\ \psi(2p3d\ ^3P) - 0.06\ \psi(2p3s\ ^3P) + 0.004\ \psi(2s2p\,^3P)$$

L'interaction spin orbite est rigoureusement diagonale par rapport à ℓ , en général, les états ayant la même valeur du moment orbital ℓ et des valeurs différentes du nombre quantique principal n ont des énergies très différentes; l'effet de ces éléments non diagonaux par rapport à n de l'interaction spin orbite est alors négligeable. Cependant, lorsque n augmente, l'élément diagonal $< nl/\ \zeta(r)/nl>$ diminue comme $\frac{1}{n^3}$ d'après (3.20),l'introductio du terme du second ordre dans le développement de l'énergie due aux termes non diagonaux peut alors produire un effet appréciable.

Il faut remarquer ici que l'effet des éléments non diagonaux, bien qu'étant une correction au deuxième ordre pour l'énergie, représente une correction au premier ordre pour la fonction d'onde. Cette remarque servira au § suivant.

Pour obtenir des solutions exactes, il faudrait développer la fonction propre du hamiltonien total sur une base infinie de fonctions, c'est à dire, inclure un nombre infini de configurations. Pour que les calculs soient possibles, il est indispensable de tronquer la base; le choix des configurations à inclure est crucial pour rendre compte des propriétés de l'atome.

A la limite des grands Z et d'un nombre N fini d'électrons, Layzer (1959) a montré qu'on peut rendre compte de certaines propriétés atomiques (lois empiriques, donnant la variation avec Z le long d'une séquence isoélectrique, du potentiel d'ionisation, et de la différence d'énergie de deux termes appartenant à la même configuration) en incluant les interactions entre configurations appartenant au même complexe. Un complexe est l'ensemble de configurations ayant les mêmes nombres quantiques principaux n et la même parité. La signification physique de la notion de complexe est contenue dans le fait que l'énergie d'un complexe est dégénérée à la limite ou $(Z-N+1) \to \infty$. Les configurations appartenant au même complexe ont donc des énergies très voisines, condition favorable à de fortes interactions de configurations.

Il faut au moins étendre la base $\{|\psi(\tau_i)>\}$ à toutes les configurations d'un même complexe. Mais, cela peut ne pas être suffisant. On choisit des configurations comportant des niveaux d'énergie proches susceptibles d'interagir fortement. Ceci suppose qu'un grand nombre de niveaux d'énergie soit observé. Pour certains atomes et certains degrés d'ionisation, ces niveaux sont répertoriés dans les tables de C. Moore (1949), les tables de Wiese (1966) ou de Kelly (1968). Pour des atomes moins étudiés, on devra d'abord faire un calcul en choisissant un certain nombre de configurations a priori, suivant les critères énoncés plus haut, afin d'obtenir une valeur approchée de l'énergie des niveaux, puis sélectionner ensuite les configurations suivant le problème physique que l'on veut traiter.

Dans les conditions coronales, les atomes sont fortement ionisés, l'inclusion d'un nombre limité de configurations dans la base de fonctions d'onde permet d'obtenir des résultats satisfaisants. Ainsi, pour OV, une structure atomique comprenant neuf configurations reproduit les niveaux d'énergie avec une précision de 5 % par rapport aux valeurs expérimentales (voir preprint ci-joint).

Pour des atomes lourds comme Fe comprenant encore un grand nombre d'électrons même pour des degrés d'ionisation comme Fe X, le nombre de termes générés par des configurations telles que $3s^2 3p^4$ devient important et ceci limite assez vite l'extension de la base par défaut de capacité des mémoires des ordinateurs. Pour de tels ions on doit donc se limiter à un petit nombre de configurations, le choix demande beaucoup de précautions.

Dans la méthode Hartree Fock multiconfigurationnelle, la fonction d'essai est une superposition de fonctions représentant différentes configurations, les coefficients,aussi bien que les fonctions de cette combinaison, étant déterminés par application du principe variationnel. La dépendance mutuelle des quantités que l'on fait varier étant très forte, cette méthode a souvent des problèmes de convergence.

Pour les ions appartenant à la même séquence isolectronique, les corrélations sont les mêmes,mais leur importance par rapport au terme d'attraction coulombienne du noyau devient de plus en plus grande quand Z diminue. Plus l'on se rapproche de l'atome neutre de la séquence, plus il faudra décrire les corrélations de façon précise , donc introduire un nombre de configurations de plus en plus grand. Pour les neutres, il faut alors faire appel à des méthodes plus sophistiquées telles que la méthode des pseudo-configurations développée par Burke et Mitchell (1974) d'une part,et par Le Dourneuf, Van Regemorter et Vo Ky Lan (1974) d'autre part, qui permet de réduire fortement le nombre de configurations dont il faut tenir compte et de ne pas avoir à les choisir de manière parfois arbitraire. Vo Ky Lan (1975) a mis au point un programme qui calcule ces pseudo-configurations,qui complète et simplifie le programme Hartree Fock multiconfigurationnel de Hibbert (1970)et (1971).

II - PROBABILITES DE TRANSITION RADIATIVE

1 - Expression des probabilités de transition radiative

La résolution de l'équation de Schrödinger pour le système atomique isolé détermine les énergies des états propres et les fonctions propres de ce système. Or, l'observation d'un atome se fait par l'intermédiaire des raies spectrales qui proviennent de transitions entre deux états propres de l'atome par émission ou absorption d'un photon. On observe donc, non pas l'atome isolé, mais l'atome en interaction avec un champ de rayonnement. Le hamiltonien d'un atome en présence d'un champ électromagnétique est :

$$H = H_{\text{atome}} + H_{\text{rayonnement}} + H_{\text{interaction}} \qquad (1.1)$$

H_{atome} est le hamiltonien de l'atome isolé dont la recherche des états propres $|\psi_m\rangle$ a été l'objet du premier chapitre. $H_{\text{rayonnement}}$ est le hamiltonien du rayonnement libre dont les états propres $|\varphi_m\rangle$ sont donnés par la théorie quantique du rayonnement.

$H_{\text{interaction}}$ représente l'interaction entre l'atome et le rayonnement et s'exprime en fonction du moment $\vec{p}(j)$ de l'électron j, du potentiel vecteur électromagnétique $\vec{A}(j)$ créé au niveau de l'électron j et du moment magnétique $\vec{\mu}(j) = 2\beta\,\vec{s}(j)$ du spin $\vec{s}(j)$ de l'électron j :

$$H_{\text{interaction}} = -\sum_j \left(\frac{e}{m_e c}\, \vec{A}(j).\vec{p}(j) + \vec{\mu}(j).\vec{\mathcal{H}}(j) \right)$$

$$= -\beta \sum_j \left(2i\, \vec{A}(j).\vec{\nabla}(j) + 2\vec{s}(j).\vec{rot}\,\vec{A}(j) \right) \qquad (1.2)$$

où $\beta = \dfrac{e\hbar}{2m_e c} = \alpha\, a_o \dfrac{e}{2}$ est le magneton de Bohr.

Le deuxième terme de ce hamiltonien représente l'interaction entre le moment magnétique $\vec{\mu}$ (j) du spin de l'électron et le champ magnétique $\vec{\mathcal{H}}$ (j)=rot $\vec{A}$ (j) L'interaction électromagnétique s'exprimant par une petite constante de couplage sans dimensions qui est la constante de structure fine $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$ est relativement faible. Il en résulte, que l'interaction de l'atome et du champ électromagnétique peut, en règle générale, être traitée par la théorie des perturbations. Les états propres $|m>$ du hamiltonien non perturbé

$$H^\circ = H_{\text{atome}} + H_{\text{rayonnement}}$$

sont les produits des états propres atomiques $|\psi_m>$ et des états propres du champ électromagnétique $|\varphi_m>$

$$|m> = |\psi_m> |\varphi_m> = |\psi_m, \varphi_m> \qquad (1.3)$$

les états propres atomiques $|\psi_m>$ sont ceux déterminés dans le chapitre I (on néglige l'effet du champ de rayonnement sur les états atomiques). Les états propres du champ de rayonnement sont caractérisés par le nombre de photons ayant une longueur d'onde, une direction de propagation et une polarisation déterminées.

Un état propre $|E>$ du hamiltonien total $H = H^\circ + H_{\text{interaction}}$ se développe sur les états propres non perturbés suivant :

$$|E> = \sum_m c_m(t) |\psi_m, \varphi_m>$$

les coefficients $c_m(t)$ sont donnés par la théorie des perturbations dépendant du temps. Si, initialement, le système est dans l'état $|\psi_i, \varphi_i>$, seul le coefficient c_i est différent de zéro. A l'instant t = o on branche la faible perturbation $H_{\text{interaction}}$, la présence du terme d'interaction produit des transitions entre états non perturbés, et à l'instant t, il y a une probabilité $|c_m(t)|^2$ de trouver le système dans l'état $|\psi_m, \varphi_m>$.

On désigne par probabilité de transition, la probabilité par unité de temps d'observer une transition directe d'un état initial i vers un état final f :

$$w(i \to f) = \frac{2\pi}{h^2 c} \left| < \psi_f, \varphi_f \mid H_{interaction} \mid \psi_i, \varphi_i > \right|^2 \qquad (1.5)$$

Le développement multipolaire du champ de rayonnement, c'est à dire de son potentiel vecteur $\vec{A}$, met en évidence, dans le champ électromagnétique, une part due aux sources électriques et une part due aux sources magnétiques. L'évaluation de la contribution du rayonnement multipolaire électrique et magnétique, dans le hamiltonien d'interaction (1.2), permet d'obtenir les probabilités d'émission pour ces deux types de rayonnement.

Dans l'approximation des grandes longueurs d'onde où l'on suppose que la longueur d'onde λ_{ph} du photon est beaucoup plus grande que les dimensions atomiques qui sont de l'ordre de a_o ($a_o / \lambda_{ph} << 1$), la probalité d'émission spontanée, encore appelée probabilité de transition spontanée d'Einstein s'écrit, suivant Shore et Menzel (1968), pour le rayonnement multipolaire électrique (p. 439) :

$$A^e(i \to f) = \frac{1}{\hbar} \left| \sum_{\lambda\mu} i^\lambda \frac{\sqrt{k^{2\lambda+1}}}{(2\lambda-1)!!} \left\{ \frac{2(\lambda+1)}{\lambda(2\lambda+1)} \right\}^{1/2} < \psi_f \mid Q^\lambda_\mu \mid \psi_i > \right|^2 \qquad (1.6)$$

et pour le rayonnement multipolaire magnétique (p. 436) :

$$A^m(i \to f) = \frac{1}{\hbar} \left| \sum_{\lambda\mu} i^{\lambda+1} \frac{\sqrt{k^{2\lambda+1}}}{(2\lambda-1)!!} \left\{ \frac{2(\lambda+1)}{\lambda(2\lambda+1)} \right\}^{1/2} < \psi_f \mid M^\lambda_\mu \mid \psi_i > \right|^2 \qquad (1.7)$$

Dans les expressions (1.6) et (1.7), on a introduit les opérateurs moments multipolaires électriques :

$$Q^\lambda_\mu = \sum_j e\, r^\lambda(j)\, C^\lambda_\mu(j) \qquad (1.8)$$

et les opérateurs moments multipolaires magnétiques :

$$M^\lambda_\mu = \sum_j \beta \sqrt{\lambda(2\lambda-1)}\, \nabla(r^\lambda(j)\, C^\lambda(j)) \left\{ \frac{2}{\lambda+1} L(j) + 2S(j) \right\} \qquad (1.9)$$

en fonction du tenseur de Racah d'ordre λ, C^{λ}, dont les composantes sont définies par :

$$C^{\lambda}_{\mu} = \left(\frac{4\pi}{2\lambda+1}\right)^{1/2} Y^{\lambda}_{\mu}(\theta,\phi) \qquad (1.10)$$

λ représente le moment du photon et μ sa projection sur l'axe de quantification. La sommation dans (1.8) et (1.9) est effectuée sur les électrons de l'atome se trouvant à la distance r(j) du noyau, L(j) et S(j) représentant respectivement l'opérateur moment orbital et l'opérateur de spin de l'électron j; k est le nombre d'onde du photon émis, lié à sa longueur d'onde λ_{ph} (ne pas confondre avec le λ ci-dessus) par $k = \frac{2\pi}{\lambda_{ph}} = \frac{1}{\lambda\!\!\!^{-}_{ph}}$

Le calcul d'une probabilité de transition implique d'après (1.6) et (1.7), le calcul des éléments de matrice des opérateurs Q^{λ}_{μ} et M^{λ}_{μ} pour un nombre infini de valeurs de λ et μ. En réalité, seuls les premiers termes du développement multipolaire contribuent de façon appréciable à la probabilité de transition.En effet,si on prend comme ordre de grandeur des dimensions de l'atome a_o (il faudrait écrire plus correctement $\frac{n^2 a_o}{Z-N+1}$ mais cela ne change rien à la discussion qui suit), l'ordre de grandeur des moments multipolaires électriques est :

$$Q^{\lambda}_{\mu} \sim e\, a_o^{\lambda}$$

l'ordre de grandeur des moments multipolaires magnétiques est :

$$M^{\lambda}_{\mu} \sim \beta\, a_o^{\lambda-1} = \frac{\alpha}{2}\, e\, a_o^{\lambda}$$

on a pour la probabilité de rayonnement multipolaire électrique et magnétique d'ordre λ :

$$A^{e,\lambda}(i \to f) \sim e^2 k\, (ka_o)^{2\lambda}$$

$$A^{m,\lambda}(i \to f) \sim \alpha^2 e^2 k (ka_o)^{2\lambda} \qquad (1.11)$$

lorsque le degré de multipolarité augmente de 1, la probabilité de rayonnement électrique et magnétique est multipliée par le rapport $(ka_o)^2 = \left(\frac{a_o}{\lambda\!\!\!^{-}_{ph}}\right)^2 \ll 1$ dans l'approximation des grandes longueurs d'onde faite précédemment.

Les lois de conservation du moment et de la parité conduisent à des règles de sélection déterminées, limitant les transitions possibles entre états du système rayonnant. Si le moment initial de l'atome est J_i, après émission d'un photon de moment λ, le moment final de l'atome J_f ne peut prendre que les valeurs déterminées par la règle d'addition des moments :

$$|J_i - J_f| < \lambda < J_i + J_f \qquad (1.12)$$

de même pour des valeurs données de J_i et J_f, les valeurs possibles du moment du photon seront données par la même règle. Comme la probabilité de rayonnement décroît rapidement quand λ croît, le rayonnement a lieu essentiellement avec la multiplicité minimum possible.

Les projections M_i et M_j des moments J_i et J_f vérifient avec la projection μ du moment du photon, (de par la règle d'addition des moments), la relation ;

$$M_i = \mu + M_f \qquad (1.13)$$

Les parités des états initiaux Π_i et finals Π_f du système rayonnant doivent vérifier :

$$\Pi_i = \Pi_f \times \Pi_\lambda \qquad (1.14)$$

Π_λ étant la parité du photon rayonné.

Ces règles de sélection d'après le moment total et la parité sont rigoureuses.

La parité d'une fonction d'onde atomique est :

$$\Pi_{atome} = (-1)^{\Sigma \ell(j)}$$

La parité du rayonnement multipolaire électrique est :

$$\Pi^{e,\lambda} = (-1)^{\lambda}$$

et celle du rayonnement multipolaire magnétique :

$$\Pi^{m,\lambda} = (-1)^{\lambda-1}$$

Si la parité de l'atome change au cours de la transition, d'après (1.14), la parité du photon devra être égale à (-1), le rayonnement émis ne pourra donc être que celui d'un multipôle électrique d'ordre impair et d'un multipôle magnétique d'ordre pair. D'après (1.11) la probabilité de rayonnement dipolaire électrique (s'il est permis par les règles de sélection) est beaucoup plus grande que les probabilités des transitions multipolaires électriques. La probabilité de transition dipolaire électrique est d'après (1.6)

$$A^{e,1}(i,j) = \frac{64\pi^4}{3\,h} \frac{1}{\lambda^3_{ph}} \left| \langle \psi_f \left| Q^1_\mu \right| \psi_i \rangle \right|^2 \qquad (1.15)$$

les valeurs typiques de $A^{e,1}$, dans la plage optique du spectre des atomes, sont de l'ordre de 10^8 s^{-1} dans le visible, 10^{10} à 10^{11} s^{-1} dans le domaine EUV. En spectroscopie des atomes, le rôle majeur incombe précisément aux transitions dipolaires électriques qui, pour cette raison, ont été dénommées "transitions permises". Le rayonnement magnétique d'ordre le plus bas liant deux états atomiques de parité opposée est le quadrupôle magnétique; d'après (1.11) le rapport entre la probabilité de ce rayonnement et la probabilité du rayonnement dipolaire électrique est :

$$\frac{A^{m,2}}{A^{e,1}} \sim \alpha^2 (ka_o)^2$$

Comme $\alpha^2 \simeq 5\ 10^{-5}$ et $(ka_o << 1)$ la probabilité de rayonnement quadrupolaire magnétique est tout à fait négligeable quand une transition dipolaire électrique est permise. Ce rayonnement magnétique, étudié par Garstang (1967), ne joue en fait un rôle que pour les transitions interdites par les règles de sélection du dipôle électrique. Ainsi pour O V les niveaux $2s2p\ ^3P_2$ et $2s^2\ ^1S_0$ sont liés radiativement par une transition quadrupolaire magnétique dont la probabilité est $2\ 10^{-2}\ s^{-1}$ (Cf. article ci-joint). Un exemple astrophysique intéressant qui met en jeu une transition quadrupolaire magnétique est le suivant : la variation de l'intensité de la raie λ_{ph}=3454 Å, observée le long d'une condensation coronale lors de l'éclipse de 1952, suggère d'attribuer cette raie à l'ion Fe X. La longueur d'onde, voisine de celle correspondant à la différence d'énergie entre les deux niveaux $3s^23p^43d^4F_{9/2}$ et $3s^23p^43d^4D_{7/2}$ de cet ion, incite à l'identifier à la raie dipolaire magnétique entre ces deux niveaux. Or l'intensité de cette raie dépend de la population du niveau métastable inférieur de la transition $3s^23p^43d^4D_{7/2}$; pour connaître la population de ce niveau, il faudra inclure dans les processus de desexcitation, l'émission spontanée d'un photon quadrupolaire magnétique vers le fondamental $3s^23p^5\ ^2P_{1/2,\ 3/2}$. Ceci a été suggéré par H. Mason (1975).

Si l'atome se retrouve dans un état final de même parité que celle de l'état initial, la transition ne peut être que multipolaire électrique d'ordre pair et multipolaire magnétique d'ordre impair. L'ordre le plus bas de ces rayonnements est donc l'ordre 2 pour le multipôle électrique et l'ordre 1 pour le multipôle magnétique. Le rapport de la probabilité du rayonnement dipolaire magnétique à la probabilité de rayonnement quadrupolaire électrique a pour ordre de grandeur :

$$\frac{A^{m,1}}{A^{e,2}} \sim \frac{\alpha^2}{(ka_o)^2} \sim \left(\frac{\lambda\!\!\!^{-}_{\alpha}}{a_o}\right)^2$$

D'après les règles de sélection établies plus loin les transitions dipolaires magnétiques ne peuvent intervenir qu'entre composantes de structure fine d'un même terme pour lesquelles une longueur d'onde typique est 5000 Å. Par conséquent, pour des transitions où quadrupôle électrique et dipôle magnétique entrent en concurrence, ce dernier sera toujours plus probable (rapport de l'ordre de 10^4). C'est le cas bien connu des raies "interdites" du spectre visible de la couronne.

La probabilité du rayonnement dipolaire magnétique s'écrit d'après (1.6)

$$A^{m,1} = \frac{64\pi^4}{3h} \frac{1}{\lambda^3_{ph}} \left| < \psi_f \left| M^1_\mu \right| \psi_i > \right|^2 \qquad (1.16)$$

celle du rayonnement quadrupolaire électrique :

$$A^{e,2} = \frac{64\pi^6}{15h} \frac{1}{\lambda^5_{ph}} \left| < \psi_f \left| Q^2_\mu \right| \psi_i > \right|^2 \qquad (1.17)$$

2 - Différentes règles de sélection suivant le type de couplage

En l'absence de champ extérieur, le hamiltonien d'un atome commute avec le moment total de l'atome J, par conséquent, un niveau d'énergie correspondant à une valeur donnée de J est (2 J + 1) fois dégénéré, chacun des (2J+1) sous niveaux Zeeman étant caractérisé par une valeur différente de M . Suivant la nomenclature adoptée dans T.A.S.(p. 97), une transition entre niveaux donne naissance à une raie, le rayonnement émis lors d'une transition entre états est une composante de la raie. Une raie représente donc toutes les transitions possibles entre états appartenant à deux niveaux. Les composantes d'une raie ont même fréquence ν sauf si l'atome est perturbé par un champ extérieur.

Lorsque l'atome passe spontanément de l'état initial i caractérisé par les nombres quantiques $\alpha'J'M'$ à l'état final f caractérisé par les nombres quantiques α JM, l'intensité émise dans la composante correspondante de la raie est en $erg/cm^{-3}/s^{-1}$:

$$I(\alpha'J'M',\alpha JM) = N(\alpha'J'M')A(\alpha'J'M',\alpha JM)\ h\nu \qquad (2.1)$$

ou $N(\alpha'J'M')$ est le nombre d'atomes dans l'état initial par unité de volume. Les lettres α et α' désignent les groupes des autres nombres quantiques, à part ceux explicitement indiqués, déterminant les états atomiques.

Sauf, si l'atome est plongé dans un fort champ magnétique, on ne résout pas les composantes Zeeman et on observe la somme des intensités des composantes d'une raie, ce qui n'est correct que si les états Zeeman sont incohérents, Barrat et Cohen Tannoudji (1961),l'intensité observée s'écrit :

$$I(\alpha'J',\alpha J) = h\nu \sum_{M,M'} N(\alpha'J'M')A(\alpha'J'M',\alpha JM) \qquad (2.2)$$

Si les conditions d'excitation des atomes sont suffisamment isotropes,de telle sorte qu'aucune excitation sélective d'un sous niveau particulier ne se produise, tous les sous niveaux Zeeman sont également peuplés, ceci est la définition de l'excitation naturelle suivant T.A.S. Dans l'étude des raies UV émises par la couronne, on peut en général supposer que l'excitation se fait de façon isotrope (excitation par collisions électroniques); la raie émise ne sera pas polarisée. Ceci n'est peut être plus vrai dans les flares où il existe probablement des jets directifs de particules chargées (électrons et protons) très énergétiques. Les raies interdites visibles de la couronne (raie verte du Fe XIV en particulier) peuvent être polarisées,car l'excitation par le champ photosphérique anisotrope,concurrence l'excitation collisionnelle isotrope.

Dans le cas d'excitation naturelle, la population N ($\alpha'J'$) du niveau J' sera :

$$N(\alpha'J') = (2J'+1)\, N(\alpha'J'M') \tag{2.3}$$

On définit un coefficient d'Einstein d'émission spontanée A ($\alpha'J'$, αJ) pour la raie par la relation :

$$N(\alpha'J')A(\alpha'J',\alpha J) = \sum_{MM'} N(\alpha'J'M')A(\alpha'J'M',\alpha JM) \tag{2.4}$$

A ($\alpha'J',\alpha J$) est donc une moyenne sur les sous niveaux initiaux M' et une somme sur les sous niveaux finaux M :

$$A(\alpha'J',\alpha J) = \frac{1}{2J'+1} \sum_{MM'} A(\alpha'J'M', \alpha JM) \tag{2.5}$$

L'intensité émise dans la raie est donc :

$$I(\alpha'J',\alpha J) = N(\alpha'J')\, A(\alpha'J',\alpha J)\, h\nu \tag{2.6}$$

N ($\alpha'J'$) est fournit par la résolution de l'équilibre statistique, le calcul de A ($\alpha'J',\alpha J$) commence par celui de A ($J'M',JM$), c'est à dire par le calcul des éléments de matrice :

$$|< \alpha JM|\ T^{\lambda}_{\mu}\ |\ \alpha'J'M' >|^2 \tag{2.7}$$

ou T^{λ}_{μ} symbolise les opérateurs multipolaires électriques ou magnétiques.

Les probabilités d'Einstein d'absorption B (αJ, $\alpha'J'$) et d'émission induite $B(\alpha'J', \alpha J)$ sont liées à la probabilité d'émission spontanée $A(\alpha'J',\alpha J)$ par des relations obtenues à partir de considérations d'équilibre :

$$g(J')A(\alpha'J',\alpha J) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\, g(J')B(\alpha'J',\alpha J) = \frac{8\pi h\,\nu^3}{c^3}\, g(J)B(\alpha J,\alpha'J') \tag{2.8}$$

g (J) = 2J + 1, g (J') = 2J' + 1 sont les poids statistiques respectifs des niveaux J et J'.

On caractérise souvent la raie par sa force d'oscillateur en absorption f ($\alpha J, \alpha' J'$) ou en émission f ($\alpha' J' \alpha J$). Cette force d'oscillateur est définie comme le nombre d'oscillateurs classiques par atomes capables d'absorber un rayonnement d'énergie correspondant à la transition considérée. L'énergie absorbée dans un champ isotrope de densité $\rho(\nu)$ lors de la transition $J \rightarrow J'$ est :

$$N(\alpha J)\, B(\alpha J, \alpha' J')\, h\nu\, \rho(\nu) = N(\alpha J)\, f(\alpha J, \alpha' J')\, \frac{\pi^2 e}{m_e}\, \rho(\nu) \qquad (2.9)$$

En tenant compte des relations (2.8), la force d'oscillateur en absorption f ($\alpha J, \alpha' J'$) est donc liée à la probabilité d'émission spontanée par :

$$g(J)\, f(\alpha J, \alpha' J') = g(J')\, A(\alpha' J', \alpha J) \frac{m_e c^3}{8\pi^2 e^2 \nu^2} \qquad (2.10)$$

il en est de même pour la force d'oscillateur en émission; la quantité

$$gf = g(J)\, f(\alpha J, \alpha' J') = g(J')\, f(\alpha' J', \alpha J)$$

est donc symétrique par rapport à l'état final et initial.

La dépendance de la probabilité d'émission par rapport aux nombres quantiques μ, M, M' est toute entière déterminée par le caractère tensoriel des moments multipolaires. Les quantités T^{λ}_{μ} de la relation (2.7) constituent les μ composantes de l'opérateur tensoriel irréductible T^{λ} d'ordre λ. La dépendance des éléments de matrice des quantités T^{λ}_{μ} par rapport aux nombres quantiques μ, M , M', est donnée par le théorème de Wigner Eckart :

$$\langle \alpha\, JM | T^{\lambda}_{\mu} | \alpha' J' M' \rangle = (-1)^{J-M} \begin{pmatrix} J & \lambda & J' \\ -M & \mu & M' \end{pmatrix} \langle \alpha\, J || T^{\lambda} || \alpha'\, J' \rangle \qquad (2.11)$$

L'élément de matrice de T est ainsi mis sous la forme d'un produit de facteurs, l'un le coefficient 3 j de Wigner dépend des composantes des moments suivant l'axe de quantification, l'autre, l'élément de matrice réduit $\langle \alpha\, J || T^{\lambda} || \alpha'\, J' \rangle$ est indépendant de l'orientation de l'atome.

Conformément aux règles de sélection des coefficients 3 j de Wigner la composante T^{λ}_{μ} de l'opérateur multipolaire responsable de la transition considérée est :

$$\mu = M - M'$$

et les seules contributions non nulles proviennent de moments dont la multipolarité est comprise dans les limites :

$$|J - J'| \leqslant \lambda \leqslant J + J'$$

On retrouve ainsi mathématiquement les règles de sélection rigoureuses obtenues en (1.12) d'après la conservation du moment total du système rayonnant.

En vertu de l'inégalité $J + J' \geqslant \lambda$ certaines transitions seront interdites suivant la valeur de λ

Ainsi, pour les opérateurs dipolaires, on doit avoir

$$\Delta J = 0, \pm 1$$

avec $J = 0 \rightarrow J = 0$ interdite
et pour les opérateurs quadrupolaires

$$\Delta J = 0, \pm 1, \pm 2$$

avec $J = 0 \rightarrow J = 0$, $J = 0 \rightarrow J = 1$, et $J = 1/2 \rightarrow J = J = 1/2$ interdites

En utilisant les propriétés des coëfficients 3j de Wigner, la sommation sur M et M' contenue dans la formule (2.5) s'effectue aisément :

$$\sum_{MM'} | < \alpha\, JM | T^{\mu}_{\lambda} | \alpha' J' M' > |^2 = | < \alpha J || T^{\lambda} || \alpha' J' > |^2 \sum_{MM'} \begin{pmatrix} J & \lambda & J' \\ -M & \mu & M' \end{pmatrix}^2$$

$$= | < \alpha J || T^{\lambda} || \alpha' J' > |^2 \sum_{M} \frac{1}{2J + 1}$$

$$= | < \alpha J || T^{\lambda} || \alpha' J' > |^2 \qquad (2.12)$$

La probabilité de transition A ($\alpha' J'$, αJ) est donc entièrement calculable si l'on connait les éléments de matrice réduits des moments multipolaires qui obéissent aux règles de sélection. La struture atomique

intervient dans le calcul de l'élément de matrice réduit. Les états atomiques en couplage intermédiaire sont, d'après le premier chapitre, des combinaisons linéaires d'états de même valeur de J , mais de valeurs différentes de L et S :

$$|\alpha' J' > = \sum_j c_j |\tau_j \; S_j \; L_j J'> \qquad (2.13)$$

$$|\alpha \; J \; > = \sum_i c_i |\tau_i \; S_i \; L_i J >$$

L'élément de matrice réduit entre états construits en couplage intermédiaire s'écrit donc :

$$| < \alpha J || T^{\lambda} || \alpha' J' > |^2 = | \sum_i \sum_j c_i c_j <\tau_i S_i L_i J \; || T^{\lambda} || \tau_j S_j L_j J' > |^2 \qquad (2.14)$$

On commence donc par calculer les éléments de matrice réduits entre états construits suivant le type de couplage LS. Ces états sont caractérisés outre le moment total J, par des valeurs déterminées du moment orbital et du spin, conservés dans ce cas. De sorte que les transitions entre ces états obéissent à des règles de sélection supplémentaires. Ces règles ne sont qu'approchées et sont violées dès qu'on tient compte de l'interaction de configuration en faisant des combinaisons linéaires de fonctions telles que (2.13).

La dépendance de la probabilité de transition par rapport aux nombres SLJ peut être déterminée sous forme explicite à l'aide des formules générales établies pour les éléments de matrice des opérateurs tensoriels lors de l'addition des moments par Racah (1943)
Ainsi pour les transitions multipolaires électriques on a :

$$<\alpha SLJ \; || Q^{\lambda} || \alpha' S' L' J' > = \delta(S, S') (2J+1)^{1/2} (2J'+1)^{1/2} (-1)^{S+J+L'+\lambda}$$

$$\times \begin{Bmatrix} S & L & J \\ \lambda & L' & J' \end{Bmatrix} <\tau L || Q^{\lambda} || \tau' L' > \qquad (2.15)$$

$\delta(s,s')$ donne une règle de sélection supplémentaire pour les transitions multipolaires électriques

$$\Delta S = 0$$

qui traduit le fait que les moments multipolaires électriques sont des tenseurs orbitaux dont les matrices sont diagonales suivant le spin.

L'équation (2. 15) introduit le symbole 6j de Wigner, les propriétés de ces coefficients, résumées dans Messiah, impliquent une autre règle de sélection sur L et L' :

$$|L - L'| \leqslant \lambda \leqslant L + L'$$

ainsi, pour les transitions multipolaires électriques, outre les règles de sélection générales (1.12), dans le cas du couplage LS des règles de sélection supplémentaires imposent :

$\Delta S = 0$ $\quad \Delta L = 0, \pm 1$ sauf $L = L' = 0$ — pour les transitions dipolaires électriques

$\Delta S = 0$ $\quad \Delta L = 0, \pm 1, \pm 2$ sauf $L = L' = 0$, $L = 1$ $L' = 0$ — pour les transitions quadrupolaires électriques

Dans (2.15), on définit un facteur R_{line} par :

$$R_{line} = (2J + 1)^{1/2}(2J'+1)^{1/2}(-1)^{S+J+L'+\lambda}\begin{Bmatrix} S & J & L \\ \lambda & L' & J' \end{Bmatrix} \qquad (2.16)$$

qui donne la dépendance en J, J' et S de l'élément de matrice réduit, c'est à dire l'importance relative d'une raie à l'intérieur d'un multiplet. Des valeurs numériques de R_{line} pour les transitions dipolaires électriques sont tabulées dans Shore et Menzel (p. 449).

On a donc :

$$\langle \tau SLJ \,||Q^{\lambda}||\, \tau'S'L'J' \rangle = \delta(S,S')R_{line} \,\langle \tau L||Q^{\lambda}||\tau'L' \rangle \qquad (2.17)$$

On peut enfin écrire l'élément de matrice réduit $\langle \tau L||Q^{\lambda}||\tau\ 'L'\rangle$ sous la forme du produit d'un élément de matrice réduit $\langle n\ \ell||C^{\lambda}r^{\lambda}||n'\ell'\rangle$ qui ne dépend que des nombres quantiques de l'électron effectuant la transition et d'un facteur $R_{multiplet}$ qui dépend des configurations de l'état initial et de l'état final :

$$\langle \tau L||Q^{\lambda}||\tau' L'\rangle = \sum R_{multiplet} \quad \langle n\ell||C^{\lambda}\ r^{\lambda}||\ n'\ell'\rangle \tag{2.18}$$

la somme $\sum$, étant effectuée sur les électrons des couches incomplètes est le plus souvent réduite à un seul terme.

$$\langle n\ell||C^{\lambda}r^{\lambda}||n'\ell'\rangle = \langle \ell||C^{\lambda}||\ell'\rangle \int P_{n\ell}(r)\ P_{n'\ell'}(r)\ r^{\lambda}\ dr \tag{2.19}$$

avec

l'élément de matrice du tenseur de Racah C^{λ} s'écrit :

$$\langle\ \ell\ ||C^{\lambda}||\ell'\rangle = \sqrt{2\ell+1}\quad \sqrt{2\ell'+1}\begin{pmatrix} \ell'\lambda\ \ell \\ 0\ 0\ 0 \end{pmatrix} \tag{2.20}$$

les propriétés du coefficient 3j imposent la règle de sélection

$$|\ell-\ell'| \leq \lambda \leq \ell+\ell'$$

la somme $\ell' + \ell + \lambda$ doit être paire :

- soit pour les transitions dipolaires $\Delta\ell = \pm 1$
- et pour les transitions quadrupolaires $\Delta\ell = 0, \pm 2$

on retrouve ainsi mathématiquement la règle de parité.

L'intégrale de transition :

$$I(n,\ell,n'\ell') = \int P_{n\ell}(r) P_{n'\ell'}(r) r^{\lambda}\ dr \tag{2.21}$$

dépend du champ central dans lequel se meuvent les électrons.

Le calcul de $R_{multiplet}$ est plus compliqué, car il dépend des configurations des états de départ et d'arrivée ; plusieurs cas sont traités dans Shore et Menzel (P. 467), Dekker (1969), Shalit and Talmi (1963). On obtient finalement :

$$\langle \tau\, SLJ \,||Q^{\lambda}||\tau'S'L'J' \rangle = \delta(S,S')\, R_{line}\, R_{multiplet} \langle \ell||C^{\lambda}||\ell' \rangle I(n\,\ell, n'\ell') \tag{2.22}$$

Dans le cas du couplage LS, apparaissent, pour les transitions dipolaires magnétiques, des règles de sélection supplémentaires encore plus restrictives que dans le cas électrique. Ceci est dû au fait que le moment dipolaire magnétique s'exprime au moyen des opérateurs des moments orbital et de spin totaux :

$$M^1 = \beta\,(L + 2\,S) = \beta\,(J + S)$$

En appliquant les mêmes formules générales que celles utilisées en (2.15), on obtient pour l'élément de matrice réduit de l'opérateur dipolaire magnétique :

$$\langle \tau SLJ \,||L + 2S||\tau'S'L'J' \rangle = \sqrt{2J+1}\ \sqrt{2J'+1} \tag{2.23}$$

$$\times\, \delta(S,S')(-1)^{L+1+S+J'} \begin{Bmatrix} L & 1 & L' \\ S & J' & J \end{Bmatrix} \langle \tau\, L \,||L||\tau'L' \rangle$$

$$+\delta(L,L')(-1)^{S'+1+J+L} \begin{Bmatrix} S' & 1 & S \\ J & L & J' \end{Bmatrix} \langle \tau S||S||\,\tau'S' \rangle$$

Le calcul de l'élément de matrice réduit peut, dans ce cas, être mené jusqu'au bout, car l'élément de matrice réduit d'un moment J par rapport aux fonctions propres de ce moment est donné par la formule :

$$\langle\, \tau J||J||\tau'J' \rangle = \delta(\tau,\tau')\,\delta(J,J')\sqrt{J(J+1)\ (2J+1)} \tag{2.24}$$

d'où les règles de sélection :

$$\Delta S = 0 \qquad \Delta L = 0 \qquad \Delta\tau = 0 \qquad \Delta J = \pm 1$$

Les transitions dipolaires magnétiques ne sont possibles qu'entre composantes de structure fine d'un seul et même terme.

Ces règles de sélection, en couplage LS, sont résumées dans l'appendice I.

3 - Effet de l'interaction spin orbite et de l'interaction de configuration sur les probabilités de transition.

L'interaction spin orbite mélange des termes de mêmes valeurs de J mais de valeurs différentes de L et S à l'intérieur d'une même configuration ou entre différentes configurations. Le mélange de configurations se fait aussi par l'intermédiaire de l'interaction électrostatique entre termes de mêmes valeur de S, L et J.

La première conséquence de l'interaction de configurations est de modifier notablement les probabilités de transition des raies permises. En effet, si la fonction d'onde du niveau initial de la transition s'écrit

$$\psi^T(\tau'L'S'J') = c_1\,\psi(\tau'L'S'J') + c_2\,\psi(\tau_2L_2S_2J')$$

l'élément de matrice réduit intervenant dans le calcul de la probabilité de transition dipolaire électrique entre ce niveau initial et le niveau final τLSJ, représenté par la fonction d'onde $\psi^T(\tau LSJ)$, devient :

$$|\langle\psi^T(\tau'L'S'J')||\,Q^1\,||\psi^T(\tau LSJ)\rangle|^2 \qquad (3.1)$$

$$= |c_1\langle\,\psi\,(\tau'L'S'J')||\,Q^1\,||\,\psi(\tau LSJ)\rangle \;+\; c_2\,\langle\psi(\tau_2L_2S_2J'||\;\;Q^1\,||\;\;\psi(\tau LSJ)\rangle|^2$$

Suivant le signe des coefficients c_1 et c_2 et des éléments de matrice réduits donné par (2.22) la transition peut être affaiblie ou renforcée. Ainsi, dans le cas de de l'ion O V l'influence de la configuration $2p^2$ sur la configuration du fondamental $2s^2$ diminue de 25% la force d'oscillateur de la transition de résonance $2s^2\ {}^1S - 2s2p\ {}^1P$. L'effet peut être encore plus spectaculaire à cause du jeu combiné des signes dans l'élément de matrice (3.1)

En faisant des combinaisons linéaires de fonctions telles que (2.13) on introduit des probabilités de transition interdites, d'après les règles de sélection établies précédemment dans le cas où S, L et J sont de bons nombres quantiques. Si une transition est permise par les règles de sélection , entre un état $\tau_i\ S_i\ L_i\ J$ appartenant à la combinaison linéaire représentant l'état initial d'une part, et un état $\tau_j\ S_j\ L_j\ J$ appartenant à la combinaison linéaire représentant l'état final d'autre part, une probabilité de transition entre l'état initial et l'état final apparaît, bien qu'en première approximation, toute transition entre ces états soit interdite.

Ainsi, les transitions dipolaires électriques entre états de multiplicité différentes ($\Delta S \neq 0$), ou transitions d'intercombinaisons, sont souvent responsables des raies "interdites" observées dans le spectre du soleil et des étoiles. L'interaction spin orbite est responsable du mélange de termes de multiplicité différente, par conséquent, plus cette interaction devient importante, ce qui est le cas pour les atomes lourds, moins les règles de sélection sur les nombres quantiques S et L sont respectées. Ceci est observé expérimentalement : les atomes légers n'ont que de très faibles transitions entre états de multiplicité différentes, alors que de telles transitions peuvent être aussi intenses que les transitions permises pour les atomes lourds. La raie $2s^2\ {}^1S_0 - 2s2p\ {}^3P_1$ observée dans le spectre des ions CIII, NIV, OV de la séquence isoélectronique du Be I est une raie d'intercombinaison dont l'existence est évidente sur l'expression des fonctions d'onde. En effet, la fonction d'onde de l'état fondamental $2s^2\ {}^1S_0$ s'écrit en couplage intermédiaire pour l'ion O V:

$$\psi^T(2s^2\,{}^1S_0) = 0.966\ \psi(2s^2\,{}^1S_0) + 0.260\ \psi(2p^2\ {}^1S_0) - 0.009\ \psi(2s3s\ {}^1S_0) - 0.006\ \psi(2p3p\ {}^1S_0) + 0.001\ \psi(2p^2\,{}^3P_0)$$

et la fonction d'onde de l'état excité $2s2p\ {}^3P_1$:

$$\psi^T(2s2p\ {}^3P_1) = 0.999\ \psi(2s2p^3P_1) + 0.005\ \psi(2p3s^3P_1) + 0.003\ \psi(2s2p^1P_1) - 0.026\ \psi(2p3d^3P_1)$$

Avec ces fonctions les principales contributions à l'élément de matrice de l'opérateur dipolaire électrique :

$$< \psi^T(2s^2\ {}^1S_0) \,||\, Q^1 \,||\, \psi^T(2s2p\ {}^3P_1)$$

sont :

$$< 0.966\ \psi(2s^2\ {}^1S_0)||Q^1||\ 0.003\ \psi(2s2p\ {}^1P_1)> = 2.9\ 10^{-3}\ <\psi(2s^2\,{}^1S_0)\|\,Q^1\,||(2s2p^1P_1)>$$
$$< 0.260\ \psi(2p^2\ {}^1S_0)||Q^1||\ 0.003\ \psi(2s2p\ {}^1P_1)> = 7.8\ 10^{-4}\ <\psi(2p^2\,{}^1S_0)\|\,Q^1\,||(2s2p^1P_1)>$$
$$< 0.001\ \psi(2p^2\ {}^3P_0)||Q^1||\ 0.999\ \psi(2s2p\ {}^3P_1)> = 9.99\ 10^{-4}\ <\psi(2p^2\,{}^3P_0)\|\,Q^1\,||(2s2p^3P_1)>$$

L'interaction spin orbite, bien que faible pour O V, est responsable de ces contributions, et conduit à une probabilité de transition dipolaire électiruqe de $2.10\ 10^3\ s^{-1}$ entre les niveaux $2s^2\ {}^1S_0$ et $2s2p\ {}^3P_1$. Cette probabilite de transition est assez grande pour que la raie d'intercombinaison soit visible dans les conditions coronales. Cette raie a été observée pour les ions C III à 1909 Å, N IV à 1487 Å et O V à 1218 Å sur des spectres pris par Burton et Ridgeley (1970) au bord du disque solaire ; sur ces spectres, elles apparaissent aussi intenses que les raies de résonance de ces ions.

Un autre effet de l'interaction de configuration est de rendre possible des transitions entre états caractérisés par des configurations différant par deux électrons. La transition entre les deux états propres de l'ion OV représentés en première approximation par $2s^2\ ^1S$, $2p3s\ ^1P$ illustre ceci. Il y a une forte interaction de configurations entre $2s^2$ et $2p^2$ si bien que l'état propre $2s^2\ ^1S$ est représenté en couplage LS par

$$\psi^T(2s^2\ ^1S) = 0.9653\psi(2s^2\ ^1S) + 0.260\psi(2p^2\ ^1S) - 0.009\psi(2s3s\ ^1S) - 0.005\psi(2p3p\ ^1S)$$

et l'état propre $2p3s\ ^1P$ par

$$\psi^T(2p3s\ ^1P) = 0.949\psi(2p3s\ ^1P) + 0.306\psi(2s3p\ ^1P) + 0.047\psi(2s2p\ ^1P) - 0.045\psi(2p3d\ ^1P).$$

Il en résulte que l'élément de matrice de l'opérateur dipolaire électrique s'écrit entre ces deux états :

$$\begin{aligned} \langle \psi^T(2s^2\ ^1S)||Q^1||\psi^T(2p3s\ ^1P)\rangle \simeq\ & 0.509 \langle \psi(2p^2\ ^1S)||Q^1||\psi(2p3s\ ^1P)\rangle \\ & + 0.289 \langle \psi(2s^2\ ^1S)||Q^1||\psi(2s3p\ ^1P)\rangle \end{aligned}$$

Les processus de cascade par de telles transitions entre configurations différant par deux électrons peuvent être plus importants que des transitions à un électron qui sont souvent les seules considérées

L'interaction spin orbite et l'interaction de configuration apparaissent donc déterminantes dans le calcul des probabilités de transition puisqu'elles sont les causes de transitions d'intercombinaison, des transitions à deux électrons et qu'elles modifient parfois de façon extrêmement importante les valeurs des probabilités de transition des raies permises par effet d'interférence.

4 - Critères de validité des fonctions d'onde et des probabilités de transition

Pour calculer les probabilités de transition il est essentiel d'utiliser les meilleures fonctions d'onde possibles. Les fonctions d'onde trouvées par le principe variationnel sont celles qui rendent l'énergie minimale ; par conséquent, de faibles variations des fonctions d'onde auront peu d'effet sur les valeurs de l'énergie, alors qu'elles seront répercutées intégralement dans le calcul des probabilités de transition. Un accord entre les valeurs des niveaux d'énergie déterminées expérimentalement et théoriquement ne peut donc servir de critère pour tester les fonctions d'onde. La comparaison des probabilités de transition calculées avec les mêmes fonctions d'onde à partir de trois expressions différentes de l'élément de matrice de l'opérateur dipolaire électrique constitue un bon test de validité des fonctions d'onde.

L'élément de matrice de l'opérateur dipolaire électrique qui intervient dans le calcul de la probabilité de transition permise (1.15) peut se mettre sous trois formes différentes : l'une est basée sur la longueur du dipôle

$$\langle \psi_f | \sum_j \vec{r}_j | \psi_i \rangle \tag{4.1}$$

l'autre sur la vitesse ou moment du dipôle $\vec{p} = m\vec{v}$ auquel correspond l'opérateur $-i\hbar\vec{\nabla}$

$$-\frac{\hbar^2}{m_e} \quad \frac{\langle \psi_f | \sum_j \vec{\nabla}_j | \psi_i \rangle}{E_f - E_i} \tag{4.2}$$

et la troisième sur l'accélération

$$\frac{\hbar^2}{m_e} \quad \frac{\langle \psi_f \mid \sum_j \Delta_j V \mid \psi_i \rangle}{(E_f - E_i)^2} \tag{4.3}$$

Si les fonctions ψ_i et ψ_f sont les fonctions propres, correspondant aux valeurs propres E_i et E_f du même hamiltonien H'

$$H' = \sum_{i=1}^{N} \frac{\vec{p}_i^2}{2m_e} + V \qquad (4.4)$$

où V est l'énergie potentielle, les trois formes de l'élément de matrice (4.1) (4.2) et (4.3) de l'opérateur sont égales. Ceci se démontre en considérant les commutateurs des opérateurs

$$H' \text{ et } \sum_{j=1}^{N} \vec{r}_j \text{ d'une part,}$$

$$H' \text{ et } \sum_{j=1}^{N} \vec{p}_j \text{ d'autre part.}$$

Cette démonstration est faite, pour le problème à une dimension, dans l'appendice II.

Si, de plus, on suppose que H' est le hamiltonien H du système atomique

$$H = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\vec{p}_i^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{r_i} \right) + \sum_{i>j=}^{N} \frac{e^2}{r_{ij}} \qquad (4.5)$$

la forme accélération du dipôle (4.3) peut encore s'écrire :

$$\frac{\hbar^2}{m_e} \frac{Ze^2}{(E_f - E_i)^2} < \psi_f \left| \sum_{j=1}^{N} \frac{\vec{r}_j}{r_j^3} \right| \psi_i > \qquad (4.6)$$

Ceci découle du fait que pour toute fonction différentiable de r_{ij}

$$(\nabla_i + \nabla_j) f(r_{ij}) = 0$$

Donc les trois formes (4.1) , (4.2) et (4.6) de l'élément de matrice de l'opérateur dipolaire électrique ne sont égales que si les fonctions d'onde ψ_i et ψ_f sont fonctions propres du hamiltonien atomique H. Par conséquent, si les fonctions d'onde décrivant l'état initial ψ^T_i et l'état final ψ^T du système atomique étaient les solutions exactes de l'équation de Schrödinger, le calcul des probabilités de transition à partir des trois formes (4.1), (4.2) et (4.6) donnerait des résultats identiques.

Quand on utilise des solutions approchées de l'équation de Schrödinger, les fonctions d'onde ψ_i^T et ψ_f^T ne sont pas en général fonctions propres du même hamiltonien et le calcul des probabilités de transitions à partir des trois formes (4.1), (4.2) et (4.6) de l'élément de matrice de l'opérateur dipolaire électrique conduisent à des résultats différents. Le problème est donc de décider quelle forme de l'élément de matrice convient le mieux suivant le type de fonction d'onde approchée.

Comme l'opérateur accélération (4.6) contient des termes variant en $\frac{1}{r^2}$ la forme accélération est plus sensible au comportement de la fonction d'onde près du noyau. Par conséquent, lorsqu'on utilise des fonctions d'onde déterminées par une méthode variationnelle, qui ne tient pas compte des corrélations dans les couches internes, la forme accélération ne sera pas bien adaptée, car la fonction d'onde est mal représentée à très courte distance. Par contre, la forme longueur fait intervenir préférentiellement les parties de la fonction d'onde calculées à grande distance, aussi, dans toutes les méthodes où le comportement asymptotique des fonctions d'onde est correct , cette forme sera-t-elle préférable. La forme vitesse se situe entre ces deux cas extrêmes.

Un accord entre les probabilités de transition calculées à partir de la forme longueur et de la forme vitesse suggère que les fonctions d'onde de l'état initial et de l'état final sont fonctions propres du même hamiltonien H'. En utilisant l'expression (4.6) de la forme accélération on suppose que l'énergie potentielle est l'énergie potentielle du système atomique ; un accord entre les résultats obtenus à partir des formes longueur et vitesse d'une part, et accélération d'autre part, indique que H' est le hamiltonien exact. Quand on utilise un hamiltonien approché, il est par conséquent inutile d'espérer obtenir un accord entre les calculs effectués à partir de trois formes. C'est pourquoi, en pratique, les calculs de forces d'oscillateur sont souvent faits en utilisant à la fois les éléments de matrice longueur et vitesse du dipôle ;

un accord entre les deux étant interprété comme un signe favorable mais cela ne permet en aucun cas de mesurer à quelle approximation les fonctions d'onde trouvées représentent les fonctions d'onde exactes.

Seule la comparaison entre le calcul et l'expérience fournit une mesure de la précision avec laquelle les forces d'oscillateur sont connues. Parmi les différentes méthodes expérimentales utilisées, la "beam foil spectroscopy" est l'une de celles qui fournit les probabilités de transition avec une précision valable. Dans ces expériences, on mesure les durées de vie des niveaux avec une incertitutde estimée environ à 10 %,compte-tenu des phénomènes de cascades.

Ainsi, par cette méthode expérimentale, Martinson et al. (1971) trouvent pour la raie de résonance $2s^2\ {}^1S - 2s2p\ {}^1P$ de l'ion O V une force d'oscillateur égale à 0.43 ± 0.05. Les valeurs calculées de cette force d'oscillateur par différentes méthodes sont résumées dans le tableau suivant :

Méthode	Référence	$f_{longueur}$	$f_{vitesse}$
Thomas Fermi	Malinovsky (1975)	0.530	
Hatree Fock (interaction de configuration)	Burke (1972)	0.525	0.492
Sinanoglu	Nicolaïdes (1973)	0.513	0.525
Sims & Whitten	Sims & Whitten (1973)	0.514	

La comparaison entre les valeurs indiquées dans ce tableau et la valeur expérimentale permet de conclure que cette force d'oscillateur est connue avec une précision d'environ 10 %.

III - SECTIONS EFFICACES DE COLLISION

La diffusion d'une particule par un atome complexe est un problème compliqué : D'une part, l'atome a une structure complexe et peut être excité durant la collision, la particule collisionnelle perdant de l'énergie ; d'autre part, dans le cas où la particule incidente est un électron, il pourra s'échanger avec les électrons atomiques durant la collision et la fonction d'onde totale devra satisfaire au principe d'exclusion de Pauli.

La collision entre une particule et un atome comprenant N électrons est un problème à (N+1) particules.
Le hamiltonien de l'atome, donné par la formule (1.6) du chapitre I, comprend un terme représentant l'interaction spin orbite de l'atome.

Dans le hamiltonien du système total, ce terme d'interaction spin orbite pourra éventuellement être négligé, suivant que la particule incidente est un électron ou un proton.En effet,la collision durant un temps caractéristique t_c,d'après la relation d'incertitude de Heisenberg, on ne pourra distinguer que des différences d'énergie ΔE telles que :

$$t_c \times \Delta E > \hbar$$

Par conséquent, si la différence d'énergie $\Delta E_{JJ'}$ entre deux niveaux de structure fine, due à l'interaction spin orbite, est telle que :

$$\Delta E_{JJ'} < \Delta E \qquad (0.1)$$

il est inutile de tenir compte du terme d'interaction spin orbite dans le hamiltonien total du système en collision.
la condition ci-dessus s'écrit encore :

$$A = \frac{t_c \, \Delta E_{JJ'}}{\hbar} < 1 \qquad (0.2)$$

Or t_c est de l'ordre de : $t_c \simeq \frac{\rho}{v}$

où ρ est le paramètre d'impact de la particule et v sa vitesse relative.

d'où

$$A = \frac{1}{2} \frac{\rho}{a_0} \frac{\Delta E_{JJ'}/I_H}{\sqrt{E/I_H}} \sqrt{\frac{m}{m_e}} < 1$$

où $a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$ et $I_H = \frac{m_e e^4}{2\hbar^2}$

sont respectivement le rayon de l'atome de Bohr et l'énergie d'ionisation de l'atome d'hydrogène.

$E = \frac{1}{2} m v^2$ est l'énergie cinétique des particules qui vaut, par exemple, 1.6 Ryd et 6.0 Ryd aux températures respectives d'existence des ions OV et Fe X.

Le paramètre d'impact est de l'ordre de grandeur des dimensions atomiques.

Si les particules incidentes sont des électrons, on ne devra tenir compte de l'interaction spin orbite que si $\Delta E_{JJ'}$ est de l'ordre de E

Même pour des ions où l'interaction spin orbite est importante comme Fe X, $\Delta E_{JJ'} \simeq 0.1$ Ryd, et la condition (0.1) est largement remplie.

Par suite, pour ce cas, dans le problème de collision, l'atome est représenté par une fonction d'onde en couplage LS

$$\psi(aSL) = \sum_i c_i \psi(\tau_i S_i L_i)$$

où a indique que l'interaction de configuration a été prise en considération

On obtiendra ainsi les sections de choc entre différents termes de l'atome LS - L'S' ; pour avoir les sections de choc entre niveaux J-J', on devra faire une transformation unitaire sur la matrice de collision en couplage LS qui sera décrite au paragraphe (4.3).

Si les particules incidentes sont des protons, on ne peut négliger l'interaction spin orbite que si, approximativement

$$50 \times \Delta E_{JJ'} < E$$

pour des ions comme Fe X, il faudra donc tenir compte de cette interaction dans le hamiltonien du système total alors que pour OV ou $\Delta E_{JJ'} = 0.002$ Ryd on pourra encore la négliger.

Dans le problème de collision l'atome doit alors être représenté par une fonction d'onde en couplage intermédiaire

$$\psi(a\,J) = \sum_i c_i \psi(\tau_i J)$$

On obtient alors directement les sections de choc entre niveaux J - J'

A - COLLISIONS ATOME-ELECTRON

1 - Formulation du problème de choc

Lors d'une collision entre un électron et un atome, l'électron caractérisé initialement par son implulsion $\hbar \vec{k}_\alpha$, et la projection m_s, de son spin sur l'axe de quantification passe au voisinage de l'atome dans l'état α' d'énergie $E_{\alpha'}$.

Après la collision, l'atome se trouve dans l'état α d'énergie E_α et l'électron dans un état caractérisé par $\vec{k}_\alpha$, m_s .

Lors de la collision, l'énergie E^T du système total (atome + électron) est conservée :

$$E^T = E_{\alpha'} + \frac{\hbar^2 k_{\alpha'}^2}{2 m_e} = E_\alpha + \frac{\hbar^2 k_\alpha^2}{2 m_e} \qquad (1.1)$$

En couplage LS, l'état α de l'atome est défini par les nombres quantiques $a S L M_S M_L$. La fonction d'onde antisymétrique $\psi_\alpha(\vec{X}_i)$ qui caractérise entièrement l'état de l'atome, a été étudiée au chapitre I. $\vec{X}_i$ représente l'ensemble des coordonnées de position et de spin $(\vec{r}_i, \vec{s}_i)$ des N électrons de l'atome.

L'électron collisionnel affecté de l'indice $i = N + 1$, a pour coordonnées $\vec{X}_{N+1} = (\vec{r}_{N+1}, \vec{s}_{N+1})$ La fonction d'onde de cet électron, caractérisé par $\vec{k}_\alpha, m_s$ et associé à l'atome dans l'état α, est :

$$\varphi_{\alpha m_s}(\vec{X}_{N+1}) = \chi\left(\frac{1}{2}, m_s\right) \varphi_\alpha(\vec{r}_{N+1}) \qquad (1.2)$$

En toute généralité, la fonction d'onde antisymétrique du système atome - électron collisionnel peut se développer sur la base orthonormée complète des fonctions d'onde atomiques :

$$\Psi(\vec{X}_i, \vec{X}_{N+1}) = \mathcal{A} \sum_{\alpha m_s} \psi_\alpha(\vec{X}_i) \chi\left(\frac{1}{2}, m_s\right) \varphi_\alpha(\vec{r}_{N+1}) \qquad (1.3.)$$

L'opérateur d'antisymétrisation

$$\mathcal{A} = \frac{1}{\sqrt{N+1}} \sum_{i=1}^{N+1} (-1)^{N+1-i} P_{i,N+1} \qquad (1.4.)$$

où $P_{i,\,N+1}$ est la permutation des indices i et N+1, introduit la possibilité d'échange entre l'électron N+1 et les électrons atomiques.

Cette fonction d'onde $\Psi(\vec{X}_i, \vec{x}_{N+1})$ doit être la solution de l'équation de Schrödinger

$$H\,\Psi(\vec{X}_i, \vec{x}_{N+1}) = E\,\Psi(\vec{X}_i, \vec{x}_{N+1}) \qquad (1.5.)$$

Où H est le hamiltonien du système total.
Pour résoudre cette équation , il est plus commode de faire une décomposition en ondes partielles de la fonction d'onde totale,dans laquelle on considère des états de moments cinétiques donnés pour l'électron collisionnel.

En effet, la fonction d'onde représentant un électron d'impulsion $\hbar \vec{k}_\alpha$ bien définie est une superposition de fonctions correspondant à tous les moments cinétiques possibles de l'électron :

$$\varphi_\alpha(\vec{r}_{N+1}) = \sum_{\ell m_\ell} \varphi_{k_\alpha \ell m_\ell}(\vec{r}_{N+1})$$

soit en faisant apparaître la fonction radiale de l'électron collisionnel

$$\varphi_\alpha(\vec{r}_{N+1}) = \sum_{\ell m_\ell} Y^{m_\ell}_{\ell}(\hat{r}_{N+1}) \frac{1}{r_{N+1}} F_{k_\alpha \ell}(r_{N+1})$$

$\hat{r}_{N+1}$ représente les coordonnées angulaires de l'électron collisionnel
A l'ensemble des nombres quantiques

$$\gamma = a\ S\ L\ M_s\ M_L\ s\ l\ m_s\ m_\ell \qquad (1.6.)$$

correspond une "voie" γ,qui caractérise l'état de l'atome et de l'électron.
On peut développer la fonction d'onde du système total en ondes partielles correspondant à chaque voie γ suivant :

$$\Psi(\vec{X}_i, \vec{x}_{N+1}) = \mathcal{A} \sum_\gamma \Phi_\gamma(\vec{X}_i, \vec{s}_{N+1}, r_{N+1}) \frac{1}{r_{N+1}} F_\gamma(r_{N+1}) \qquad (1.7)$$

où les fonctions Φ_γ forment une base orthonormée complète relativement à $\vec{X}_i$, $\vec{s}_{N+1}$, $\hat{r}_{N+1}$

$$\Phi_\gamma(\vec{X}_i, \vec{s}_{N+1}, \hat{r}_{N+1}) = \psi_\alpha(\vec{X}_i)\, \chi(\tfrac{1}{2}, m_s)\, Y^{m_\ell}_{\ell}(\hat{r}_{N+1}) \qquad (1.8)$$

Le système total,étant un "système isolé" dans l'espace, est invariant par rotation et par conséquent, le moment cinétique total $\vec{J}^T = \vec{L}^T + \vec{S}^T$ est conservé durant la collision ainsi que la parité :

$$\Pi = (-1)^{\sum_{i=1}^{N} \ell_i} \times (-1)^{\ell}$$

De plus, comme on ne tient pas compte des termes dépendant du spin dans le hamiltonien total, le moment angulaire total $\vec{L}^T = \vec{L} + \vec{\ell}$ et le spin total $\vec{S}^T = \vec{S} + \vec{s}$ sont conservés séparément lors de la collision. On définit alors une voie Γ par l'ensemble des nombres quantiques :

$$\Gamma = a\ S\ L\ s\ \ell\ S^T\ L^T\ M_{ST}\ M_{LT} \qquad (1.9)$$

S^T et L^T satisfont aux relations du triangle

$$|S - s| < S^T < S + s$$

$$|L - \ell| < L^T < L + \ell$$

On forme, à partir de la base de fonctions Φ_γ de la représentation γ, une nouvelle base de fonctions Φ_Γ, fonctions propres de $(\vec{L}^T)^2, L^T_z, (\vec{S}^T)^2, S^T_z$ et Π en utilisant le théorème d'addition des moments cinétiques :

$$\Phi_\Gamma\ (\vec{X}_i, \vec{s}_{N+1}, \hat{r}_{N+1}) = \sum_\gamma < \gamma \mid \Gamma > \Phi_\gamma\ (\vec{X}_i, \vec{S}_{N+1}, \hat{r}_{N+1}) \qquad (1.10)$$

la matrice de cette transformation unitaire s'exprime en fonction des coefficients de Clebsch Gordan

$$<\gamma' | \Gamma> = \delta\ (a'\ S'L's'\ell',\ a\ S\ L\ s\ell)\ C^{L\ \ell\ L^T}_{M_L\ m_\ell M_{LT}}\ C^{S\ s\ S^T}_{M_s\ m_s M_{sT}} \qquad (1.11)$$

On développe la fonction d'onde du système total sur cette base orthonormée complète de fonctions Φ_Γ :

$$\Psi\ (\vec{X}_i, \vec{x}_{N+1}) = \mathcal{A} \sum_\Gamma \Phi_\Gamma\ (\vec{X}_i, \vec{s}_{N+1}, \hat{r}_{N+1}) \frac{1}{r_{N+1}} F_\Gamma(r_{N+1}) \qquad (1.12)$$

Comme le hamiltonien commute avec $\vec{L}^T$ et $\vec{S}^T$ il n'y aura pas de couplage entre voies caractérisées par des valeurs différentes de $S^T\ L^T\ M_{ST}\ M_{LT}$, la fonction d'onde, en représentation Γ, correspond à des valeurs déterminées de $S^T\ L^T\ M_{ST}\ M_{LT}$ il s'ensuit que la sommation dans la formule (1.12) sera effectuée uniquement sur a S L s ℓ, la sommation sur s étant d'ailleurs réduite à la seule valeur $s = \frac{1}{2}$ du spin de l'électron collisionnel.

Les développements (1.7) et (1.12) sont des expressions exactes de la fonction d'onde du système dans la mesure où l'on considère des bases complètes.

Les fonctions radiales $F_\gamma(r_{N+1})$ et $F_\Gamma(r_{N+1})$, coefficients des développements (1.7) et (1.12) seront déterminées de façon à ce que ces développements satisfassent l'équation de Schrödinger (1.5)
En couplage LS' le hamiltonien du système est :

$$H = \sum_{i=1}^{N+1} \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta_i - \frac{Ze^2}{r_i}\right) + \sum_{i>j=1}^{N+1} \frac{e^2}{r_{ij}} \qquad (1.13)$$

On peut décomposer ce hamiltonien suivant :

$$H = H_{atome}(\vec{X}_i) + H_{electron}(\vec{x}_{N+1}) + eU_1(\vec{X}_i, \vec{x}_{N+1}) \qquad (1.14)$$

où $H_{atome}(\vec{X}_i)$ est le hamiltonien de l'atome et n'opère que sur les fonctions d'onde atomiques :

$$\langle \psi_{\alpha'}(\vec{X}_i) | H_{atome}(\vec{X}_i) | \psi_\alpha(\vec{X}_i) \rangle = E_\alpha \delta(\alpha,\alpha') \qquad (1.15)$$

$H_{électron}(\vec{x}_{N+1})$ est le hamiltonien de l'électron libre dans le potentiel central $-\frac{(Z-N)e}{r_{N+1}}$

$$H_{électron}(\vec{x}_{N+1}) = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta_{N+1} - \frac{(Z-N)e^2}{r_{N+1}} \qquad (1.16)$$

$$U_1(\vec{X}_i, \vec{x}_{N+1}) = \sum_{i=1}^{N} \frac{e}{r_{i,N+1}} - \frac{eN}{r_{N+1}} \qquad (1.17)$$

est un potentiel à courte portée qui décroît plus vite que $\frac{1}{r_{N+1}}$ quand $r_{N+1} \to \infty$

en représentation Γ on devra avoir :

$$\mathcal{A} \sum_{\Gamma''} (H - E)\, \Phi_{\Gamma''}(\vec{X}_i, \vec{s}_{N+1}, \hat{r}_{N+1}) \frac{1}{r_{N+1}} F_{\Gamma''}(r_{N+1}) = 0$$

En multipliant à gauche par $\Phi^*_\Gamma\ (\vec{X}_i, \vec{s}_{N+1}, \hat{r}_{N+1})$ et en intégrant sur les coordonnées $\vec{X}_i\ \vec{s}_{N+1}\ \hat{r}_{N+1}$ on obtient les équations radiales : (Bely 1964)

$$\left[\frac{d^2}{dr^2_{N+1}} - \frac{\ell_\Gamma\ (\ell_\Gamma+1)}{r^2_{N+1}} + \frac{2m_e}{\hbar^2} \frac{(Z-N)e^2}{r_{N+1}} + k^2_\Gamma \right] F_\Gamma (r_{N+1})$$

$$= \frac{2m_e e}{\hbar^2} \sum_{\Gamma''} (V_{\Gamma\Gamma''} - W_{\Gamma\Gamma''})\ F_{\Gamma''}(r_{N+1}) \qquad (1.18)$$

avec

$$V_{\Gamma\Gamma''} = \int \Phi^*_\Gamma\ (\vec{X}_i, \vec{s}_{N+1}, \hat{r}_{N+1})\ U_1\ \Phi_{\Gamma''}\ (\vec{X}_i, \vec{s}_{N+1}, \hat{r}_{N+1})\ d\vec{X}_i\ d\vec{s}_{N+1}\ d\hat{r}_{N+1}$$

$$W_{\Gamma\Gamma''}\ F_{\Gamma''}\ (r_{N+1})$$

$$= \frac{Nr_{N+1}}{e} \int \Phi^*_\Gamma\ (\vec{X}_i, \vec{s}_{N+1}, \hat{r}_{N+1})\ \{H-E\}\Phi_{\Gamma''}(\vec{X}_i, \vec{s}_{N+1}, \hat{r}_{N+1}) \frac{1}{r_N} F_\Gamma(r_N) d\vec{X}_i, d\vec{s}_{N+1}\ d\hat{r}_{N+1}$$

$\int d\vec{s}_{N+1}$ désigne la sommation discrète sur les valeurs du spin.

On aboutit à un système infini d'équations intégro-différentielles du second ordre couplées du même type que les équations Hartree Fock employées pour le calcul des fonctions d'onde atomiques. Les termes de potentiel direct $V_{\Gamma\Gamma''}$ et les termes de potentiel d'échange $W_{\Gamma\Gamma''}$ sont responsables des effets de couplage.

Les équations ayant des valeurs $k^2_\Gamma \geq 0$ correspondent aux voies ouvertes, celles ayant des valeurs de $k^2_\Gamma < 0$ caractérisent les voies fermées.

Si, au lieu de développer la fonction d'onde du système sur les fonctions antisymétrisées Φ_Γ, définies en (1.10) on la développait sur des fonctions similaires ne comprenant pas l'opérateur d'antisymétrisation $\mathcal{A}$, on obtiendrait un système couplé d'équations différentielles, mais sans les opérateurs $W_{\Gamma\Gamma''}$. Or, en excluant l'opérateur d'antisymétrisation, on exclue la possibilité d'échange entre les électrons atomiques et l'électron collisionnel, on en conclut que les opérateurs $W_{\Gamma\Gamma''}$ tiennent compte, dans les équations couplées, du phénomène d'échange.

Puisque H commute avec $\vec{L}^T$ et $\vec{S}^T$, les potentiels $V_{\Gamma\Gamma"}$ et $W_{\Gamma\Gamma"}$ sont diagonaux en $S^T\ L^T\ M_{ST}\ M_{LT}$ et indépendants de M_{ST} et M_{LT} ; les fonctions radiales ne dépendront que des paramètres a SL sℓ $S^T\ L^T$.

Les potentiels $V_{\Gamma\Gamma"}$ étant indépendants de S^T, les équations couplées sans échange seront indépendantes du spin.
Les potentiels $V_{\Gamma\Gamma"}$ et $W_{\Gamma\Gamma"}$ se calculent en utilisant la technique de l'algèbre de Racah, des expressions détaillées ont été obtenues par O. Bely et al.(1963), pour le potentiel d'interaction électrostatique $V_{\Gamma\Gamma"}$ et par F. Bely et Vo Ky Lan (1968) pour le potentiel d'échange $W_{\Gamma\Gamma"}$. Les coefficients angulaires intervenant dans ces potentiels peuvent être aussi calculés en utilisant des techniques plus élémentaires données par T.A.S.

Pour obtenir ces expressions, on utilise le développement multipolaire du potentiel d'interaction électrostatique entre l'électron collisionnel et les électrons atomiques :

$$\sum_{i=1}^{N} \frac{1}{r_{N+1,i}} = \sum_{i=1}^{N} \left(\sum_{\lambda=0}^{\infty} \frac{r_<^\lambda}{r_>^{\lambda+1}} \right) P_\lambda(\hat{r}_i, \hat{r}_{N+1}) \qquad (1.19)$$

$P_\lambda(\hat{r}_i,\hat{r}_{N+1})$ est le polynôme de Legendre d'ordre λ, $r_<$ et $r_>$ sont respectivement la plus petite et la plus grande des distances r_i et r_{N+1}.

En pratique, la sommation sur λ dans l'expression (1.19) ne contient qu'un petit nombre de termes. Ainsi, pour les potentiels $V_{\Gamma\Gamma"}$, quelle que soit la transition $\Gamma \neq \Gamma"$ envisagée, on doit vérifier, d'après la définition même des éléments $V_{\Gamma\Gamma"}$:

$$|L - L"| \leqslant \lambda \leqslant L + L"$$

Sur l'expression de $V_{\Gamma\Gamma"}$ il apparaît que $V_{\Gamma\Gamma"}$ est nul si $S \neq S"$, c'est à dire,que si on ne tient pas compte de l'échange, le spin de l'atome est conservé pendant la collision.

Le système d'équations couplées (1.18) ne peut être résolu de façon exacte. En pratique on néglige le continu de l'atome (quand on ne traite pas le problème de l'ionisation) et on limite le nombre de niveaux de l'atome. Ainsi pour des valeurs déterminées de L^T et S^T, il n'y aura qu'un nombre limité n de voies possibles pour le système dont n_0 seront ouvertes,et n_f fermées ($n = n_0 + n_f$).

Le système ainsi tronqué peut être résolu numériquement de façon exacte : c'est l'approximation de couplage collisionnel (close coupling approximation), notée C.C. dans la suite. Le temps de calcul et la taille des mémoires des ordinateurs, nécessaires à la résolution numérique, limitent très vite le nombre de niveaux que l'on peut inclure. La procédure habituelle est de retenir dans les équations couplées les états entre lesquels la transition a lieu et d'inclure les états qui sont fortement couplés, soit avec l'état initial, soit avec l'état final. L'approximation couplage collisionnel est bonne lorsque le couplage avec les états négligés est faible. Pour des transitions n'intéressant que des niveaux peu excités, des résultats satisfaisants peuvent être obtenus ; dans le cas de transitions entre niveaux très excités ceci conduit à un trop grand nombre d'équations couplées à résoudre numériquement, par conséquent, l'approximation couplage collisionnel n'est utilisable qu'à faible énergie.

L'approximation de couplage collisionnel présente deux défauts. Puisque le couplage avec le continu et les autres états excités est négligé, la forme asymptotique du potentiel n'inclut pas tout le potentiel de polarisation. De plus, à courtes distances, la forte interaction entre l'électron atomique et l'électron collisionnel n'est pas convenablement décrite.

Pour tenir compte de la polarisation des orbitales atomiques par le champ de l'électron incident on incorpore, par des méthodes décrites par le Dourneuf et al (1974), les effets de corrélation à longue portée en utilisant, pour décrire l'atome, des pseudo états construits a priori, indépendamment du problème de diffusion. Par ces méthodes, les corrélations à courte portée sont aussi mieux décrites en ajoutant dans le développement de la fonction d'onde du système total des fonctions d'états liés à (N+1) électrons.

L'approximation de couplage faible permet de réduire le système d'équations couplées à un système beaucoup plus simple partiellement découplé, ou complètement découplé dans les approximations des ondes déformées ("distorted wave approximation"), notée D.W. ou dans l'approximation de Coulomb Born notée C.B.

Dans le paragraphe 5 de ce chapitre, on montrera que ces méthodes approchées peuvent être utilisées dans le cas des ions coronaux, comme d'ailleurs l'approximation semi classique, qui sera traitée au paragraphe 6, dans laquelle l'atome est traité quantiquement et l'électron incident classiquement.

2 - Conditions aux limites : Définition de la matrice de diffusion S et de la matrice de réactance R.

La fonction d'onde du système solution de l'équation de Schrödinger, est soumise à des conditions aux limites afin de représenter un problème physique.

Elle doit être bornée à l'origine.

Asymptotiquement, la fonction d'onde décrivant le mouvement relatif de l'électron collisionnel par rapport à l'atome est, dans la voie d'entrée $(\alpha' m_{s'})$, la somme d'une onde plane incidente $P(\vec{k}_{\alpha'}, \vec{r}_{N+1})$ modifiée par le champ coulombien de l'atome, et d'une onde divergente dans la même voie $(\alpha' m_{s'}), Q(k_{\alpha'}, r_{N+1})$:

$$\varphi^{\infty}_{\alpha' m_{s'}}(\vec{r}_{N+1}) = P(\vec{k}_{\alpha'}, \vec{r}_{N+1}) + f_{\alpha' m_{s'} \to \alpha m_s}(\hat{r}_{N+1}, \hat{k}_{\alpha'}) \, Q(k_{\alpha'}, r_{N+1}) \qquad (2.1)$$

On définit φ^{∞} comme étant la limite quand $r_{N+1} \to \infty$ de la fonction φ

$\hat{k}_{\alpha' m_{s'}}$ est le vecteur unitaire de même direction que l'impulsion incidente $\hbar\vec{k}_{\alpha'}$

$f_{\alpha' m_{s'} \to \alpha' m_{s'}}$,fonction de l'angle de diffusion entre la direction de l'électron diffusé $\hat{r}_{N+1}$ et la direction incidente $\hat{k}_{\alpha' m_{s'}}$ est l'amplitude de diffusion élastique.

Dans les autres voies (αm_s) les fonctions d'onde du mouvement relatif de l'électro et de l'atome représentent ,loin du centre diffuseur, des ondes divergentes :

$$\varphi^{\infty}_{\alpha m_s}(\vec{k}_{\alpha'}, \vec{r}_{N+1}) = f_{\alpha' m_{s'} \to \alpha m_s}(\hat{r}_{N+1}, \hat{k}_{\alpha'}) \, Q(k_{\alpha}, r_{N+1}) \qquad (2.2.)$$

$P(\vec{k}_{\alpha}, \vec{r}_{N+1})$ et $Q(\vec{k}_{\alpha}, \vec{r}_{N+1})$ représentent respectivement l'onde plane et l'onde diffusée modifiées par le champ coulombien de l'ion.

$$P(\vec{k}_{\alpha'}, \vec{r}_{N+1}) = e^{i \vec{k}_{\alpha'} \cdot \vec{r}_{N+1}} e^{-i\xi_{\alpha'} \log(k_{\alpha'} r_{N+1} - \vec{k}_{\alpha'} \cdot \vec{r}_{N+1})} \qquad (2.3)$$

$$Q(k_{\alpha}, r_{N+1}) = \frac{e^{ik_{\alpha} r_{N+1}}}{r_{N+1}} e^{i\xi_{\alpha} \log 2k_{\alpha} r_{N+1}} \qquad \text{où } \xi_{\alpha} = \frac{(Z-N)}{k_{\alpha}} \frac{e^2 m_e}{\hbar^2}$$

Pour un atome neutre ($\xi_{\alpha} = 0$) les ondes $P(\vec{k}_{\alpha'}, \vec{r}_{N+1})$ et $Q(k_{\alpha'}, r_{N+1})$ se réduisent respectivement à une onde plane et à une onde sphérique sortante.

Quand $r_{N+1} \to \infty$ l'échange entre l'électron collisionnel et les électrons atomiques est négligeable, la fonction d'onde du système total s'écrit d'après (1.3):

$$\Psi^{\infty}(\vec{X}_i, \vec{x}_{N+1}) = \frac{1}{\sqrt{N+1}} \sum_{\alpha m_s} \psi_{\alpha}(\vec{X}_i)\chi\left(\frac{1}{2}, m_s\right) \times \left[\delta(\alpha' m_{s'}, \alpha m_s) P(\vec{k}_{\alpha}, \vec{r}_{N+1}) + f_{\alpha' m_{s'} \to \alpha m_s}(\hat{k}_{\alpha}, \hat{k}_{\alpha'}) Q(k_{\alpha}, r_{N+1})\right] \tag{2.4}$$

Il est évident que dans l'onde diffusée $\hat{r}_{N+1} = \hat{k}_{\alpha}$

Dans cette expression on peut faire apparaître l'onde coulombienne de diffusion dans la voie d'entrée, dont le comportement asymptotique est :

$$\phi_c^{\infty}(\alpha' | \vec{r}_{N+1}) \quad P(\vec{k}_{\alpha'}, \vec{r}_{N+1}) + f_c(\theta) Q(k_{\alpha'}, r_{N+1}) \tag{2.5}$$

où $f_c(\theta)$ est l'amplitude de diffusion coulombienne donnée dans Messiah (1960) (tome I appendice B):

$$f_c(\theta) = \frac{+\xi_{\alpha'}}{2k_{\alpha'} \sin^2(\theta/2)} e^{2i\sigma_0 + i\xi_{\alpha'} \log \sin^2(\theta/2)}$$

$$\sigma_0 = \arg\Gamma(1 - i\xi_{\alpha'})$$

(il s'agit ici bien entendu de la fonction gamma)

d'où :

$$\sqrt{N+1}\ \Psi^{\infty}(\vec{X}_i, \vec{x}_{N+1}) = \psi_{\alpha'}(\vec{X}_i)\chi\left(\frac{1}{2}, m_{s'}\right) \phi_c^{\infty}(\alpha' | \vec{r}_{N+1}) + \sum_{\alpha m_s} \psi_{\alpha}(\vec{X}_i)\chi\left(\frac{1}{2}, m_s\right)\left[-f_c(\theta)\delta(\alpha' m_{s'}, \alpha m_s) + f(\hat{k}_{\alpha}, \hat{k}_{\alpha'})\right] Q(k_{\alpha}, r_{N+1}) \tag{2.6}$$

2. 1. Définition des matrices S et R

Mathématiquement la forme asymptotique des solutions des équations (1.18) peut s'écrire :

- pour $k_\Gamma^2 \geqslant 0$

$$F_\Gamma^\infty(r_{N+1}) = \frac{1}{\sqrt{k_\Gamma}} \left(A_\Gamma \, e^{-i(x_\Gamma+\tau_\Gamma)} + B_\Gamma \, e^{+i(x_\Gamma+\tau_\Gamma)}\right) \qquad (2.7)$$

Avec

$$x_\Gamma = \left(k_\Gamma r_{N+1} - \frac{\ell\pi}{2} + \xi_\Gamma \log 2k_\Gamma r_{N+1} + \sigma_{\ell_\Gamma}\right) \quad \text{pour } k_\Gamma^2 > 0$$

$\sigma_\ell = \arg\Gamma(\ell_\Gamma + 1 - i\,\xi_\Gamma)$ est le déphasage coulombien pour l'onde partielle ℓ_Γ

$$x_\Gamma = \sqrt{8(k_\Gamma \xi_\Gamma) r_{N+1}} - (\ell_\Gamma + \tfrac{1}{4})\,\pi \qquad \text{pour } k_\Gamma^2 = 0$$

Le choix de la phase τ_Γ est entièrement arbitraire ; les coefficients A_Γ, B_Γ dépendent naturellement du choix de τ_Γ

- Pour $k_\Gamma^2 < 0$ on impose que

$$F_\Gamma^\infty(r_{N+1}) = 0 \qquad (2.8)$$

Avec n voies possibles, le nombre de solutions linéairement indépendantes $F_\Gamma(r_{N+1})$ est 2n mais le nombre de solutions bornées à l'origine est n puisqu'on impose n conditions

$$\lim_{r_{N+1} \to 0} F_\Gamma(r_{N+1}) = 0$$

Pour les voies fermées, on impose n_f conditions (2.8), de telle sorte qu'il reste n_o solutions linéairement indépendantes qui soient bornées partout. Ces n_o solutions indépendantes correspondent au fait qu'il existe n_o conditions initiales différentes telles que, avant le choc, le système se trouve dans l'une des n_o voies ouvertes.

On note $F_\Gamma(\Gamma' | r_{N+1})$ la solution pour la voie Γ, telle qu'initialement le système était dans la voie Γ'.

On s'intéresse maintenant au cas où toutes les voies sont ouvertes. On peut écrir la forme asymptotique (2.7) de la fonction radiale :

$$F_{\Gamma}^{\infty}(\Gamma'|r_{N+1}) = \frac{1}{\sqrt{k_{\Gamma}}}\left[\delta(\Gamma,\Gamma')\, e^{-i(x_{\Gamma}+\tau_{\Gamma})} - S_{\Gamma\Gamma'} e^{+i(x_{\Gamma}+\tau_{\Gamma})}\right] \qquad (2.9)$$

où $S_{\Gamma\Gamma'} = - B_{\Gamma} A_{\Gamma}^{-1}$, $S_{\Gamma\Gamma'}$ dépend du choix de la phase τ_{Γ} .

Ecrite ainsi, la forme asymptotique de la fonction radiale est la somme d'une exponentielle rentrante et d'une exponentielle sortante affectée d'un coefficient $S_{\Gamma\Gamma'}$. Initialement le système étant dans la voie Γ', l'électron collisionnel, infiniment éloigné, est représenté par une onde plane modifiée, somme d'une exponentielle entrante et sortante de même amplitude. Après la collision, l'amplitude de l'onde rentrante correspondant à la voie Γ' est modifiée et des ondes sortantes apparaissent dans les autres voies Γ. Ceci provient du fait que le potentiel n'a pas été coulombien partout et traduit l'action du potentiel à courte portée U_1 lors de la collision. Le coefficient $S_{\Gamma\Gamma'}$ relie l'amplitude de l'onde sortante dans la voie Γ à celle de l'onde incidente dans la voie Γ' initiale. C'est l'amplitude de probabilité de la transition $\Gamma' \to \Gamma$.

Pour montrer que $\{S_{\Gamma\Gamma'}\}$ est une matrice, on utilise le changement de représentati En représentation γ la forme asymptotique de la fonction radiale s'écrit de même :

$$F_{\gamma}^{\infty}(\gamma'|r_{N+1}) = \frac{1}{\sqrt{k_{\gamma}}}\left(\delta_{\gamma\gamma'} e^{-i(x_{\gamma}+\tau_{\gamma})} - S_{\gamma\gamma'} e^{i(x_{\gamma}+\tau_{\gamma})}\right) \qquad (2.10)$$

Les fonctions d'onde $\Psi(\Gamma'|\vec{X}_i\ \vec{x}_{N+1})$ et $\Psi(\gamma'|\vec{X}_i,\vec{x}_{N+1})$ se transforment suivant la loi

$$\Psi(\Gamma'|\vec{X}_i,\vec{x}_{N+1}) = \sum_{\gamma'} \langle\Gamma'|\gamma'\rangle \Psi(\gamma'|\vec{X},\ \vec{x}_{N+1}) \qquad (2.11)$$

On en déduit, en utilisant (1.10) que les coefficients $F_{\Gamma}(\Gamma'|r_{N+1})$ se transforment comme les éléments d'une matrice :

$$F_{\Gamma}(\Gamma'|r_{N+1}) = \sum_{\gamma\gamma'} \langle\Gamma|\gamma\rangle \quad F_{\gamma}(\gamma'|r_{N+1})\langle\gamma'|\ \Gamma'\rangle \qquad (2.12)$$

comme $\{\delta(\Gamma,\Gamma')\}$ est une matrice, on en conclut que :

$$S_{\Gamma\Gamma'} = \sum_{\gamma\gamma'} \langle\Gamma|\gamma\rangle\, S_{\gamma\gamma'}\, \langle\gamma'|\Gamma'\rangle \qquad (2.13)$$

C'est à dire que $\{S_{\Gamma\Gamma'}\}$ se transforme comme une matrice.
Puisqu'en couplage LS, le moment orbital total et le spin total sont conservés lors de la collision, la matrice S, en représentation Γ, est diagonale en L^T S^T M_{LT} M_{ST} et indépendante de M_{LT} et M_{ST} :

$$S_{\Gamma\Gamma'} = S^{(S^T L^T)}_{a\, SL\ell, a'S'L'\ell'} \delta(L^T,L'^T)\, \delta(S^T, S'^T)\, \delta(M_{LT},M_{L'T})\, \delta(M_{ST},M_{S'T}) \qquad (2.14)$$

Au lieu du développement (2.9) on peut utiliser une forme asymptotique en sinus et cosinus plus adaptée aux calculs numériques :

$$F^{\infty}_{\Gamma}(\Gamma'|r_{N+1}) = \frac{1}{\sqrt{k_\Gamma}} \left(\delta(\Gamma,\Gamma')\sin(x_\Gamma+\tau_\Gamma) + R_{\Gamma\Gamma'}\cos(x_\Gamma+\tau_\Gamma)\right) \qquad (2.15)$$

où les $R_{\Gamma\Gamma'}$ sont les éléments de la matrice de réactance R, qui dépendent également du choix de la phase τ_Γ. En faisant des combinaisons linéaires de la forme (2.15) pour obtenir (2.9) on obtient une relation entre les matrices R et S :

$$S = \frac{I + i\,R}{I - i\,R} \qquad (2.16)$$

où I est la matrice unité.

Les formes asymptotiques qui définissent les éléments des matrices R et S s'inscrivent sous forme matricielle :

$$F^{\infty} = \frac{1}{\sqrt{k}}\left[\sin(x+\tau) + R(\tau)\cos(x+\tau)\right]$$

$$F^{\infty} = \frac{1}{\sqrt{k}}\left[e^{-i(x+\tau)} - S(\tau)\, e^{+i(x+\tau)}\right] \qquad (2.17)$$

où $\frac{1}{\sqrt{k}}$, $\sin(x+\tau)$, $\cos(x+\tau)$, $e^{-i(x+\tau)}$, $e^{+i(x+\tau)}$ sont des matrices diagonales d'éléments $\frac{1}{\sqrt{k_\Gamma}}$, $\sin(x_\Gamma+\tau_\Gamma)$, etc...

Les matrices R et S dépendant du choix des phases τ_Γ, on obtient (Burke and Seaton(1971)), pour un choix différent des phases τ'_Γ :

$$R(\tau) = [\sin(\tau' - \tau) + R(\tau')\cos(\tau' - \tau)][\cos(\tau' - \tau) R(\tau')\sin(\tau' - \tau)]^{-1} \quad (2.18$$

$$S(\tau) = e^{i(\tau' - \tau)} S(\tau') e^{i(\tau' - \tau)}$$

On remarque que $|S_{\Gamma\Gamma'}|^2$ est indépendant du choix des phases.
Pour que les formes asymptotiques (2.17) représentent une solution physique il faut que pour un potentiel d'interaction $U_1 = 0$, on retrouve la forme asymptotique de l'onde coulombienne régulière à l'origine

$$F^{\infty c}_{k_\Gamma \ell_\Gamma} = \frac{1}{\sqrt{k_\Gamma}} \sin x_\Gamma$$

ce qui impose $\tau = 0$.

2.2. Propriétés des matrices S et R

En adoptant les conventions de phases habituelles, données dans T.A.S. sur les harmoniques sphériques et les coefficients de Clebsch Gordan, on peut montrer (Bely O. 1964) que la matrice R est réelle.
Elle est aussi symétrique. Pour le montrer, on considère l'intégrale $K(\Psi_1\Psi_2)$ définie par :

$$K(\Psi_1, \Psi_2) = \langle \Psi_1 | H - E | \Psi_2 \rangle - \langle \Psi_2 | H - E | \Psi_1 \rangle^* \quad (2.19)$$

Les fonctions Ψ n'étant pas normées, cette intégrale ne sera nulle que si :

$$\langle \Psi_1 | H - E | \Psi_2 \rangle = \langle \Psi_2 | H - E | \Psi_1 \rangle = 0 \quad (2.20)$$

Le calcul de cette intégrale pour deux fonctions $\Psi(\Gamma'|\vec{X}_i, \vec{x}_{N+1})$, $\Psi(\Gamma''|\vec{X}_i, \vec{x}_{N+1})$, notées plus simplement $\Psi(\Gamma')$, $\Psi(\Gamma'')$, contenant des fonctions radiales dont les formes asymptotiques sont données par (2.15), conduit à (Bely O. 1964) :

$$K(\Psi(\Gamma'), \Psi(\Gamma'')) = \frac{\hbar^2}{2m_e}(R_{\Gamma'\Gamma''} - R^*_{\Gamma''\Gamma'}) \quad (2.21)$$

Par conséquent, si les fonctions $\Psi(\Gamma')$ et $\Psi(\Gamma'')$ vérifient la relation (2.20) on obtient :

La matrice R étant réelle ceci entraîne immédiatement que :

$$R = \tilde{R} \tag{2.23}$$

($\tilde{R}$ est la matrice transposée de R, $R^{\dagger}$ est la matrice transposée conjuguée)

Il découle de la relation (2.16) que la matrice S est également symétrique :

$$S = \tilde{S} \tag{2.24}$$

La propriété de symétrie de la matrice S traduit la microréversibilité du processus $\Gamma' \rightleftarrows \Gamma''$

R étant réelle on a :

$$S^{*} = \frac{1 - iR^{*}}{1 + iR^{*}} = \frac{1 - iR}{1 + iR} = S^{-1}$$

d'où $S^{\dagger} = \tilde{S}^{*} = S^{*} = S^{-1}$

et $S^{\dagger}S = I$ (2.25)

Ce qui est la définition d'une matrice unitaire.
L'unitarité de la matrice S exprime mathématiquement la conservation du flux de particules pendant la collision.

2.3. Principe variationnel appliqué au calcul des éléments de la matrice R

Comme il a été souligné précédemment, la résolution exacte de l'équation de Schrödinger est impossible et par conséquent on doit avoir recours à des méthodes plus approchées que la résolution directe du système d'équations couplées.

Soient $\Psi^{A}(\Gamma')$ et $\Psi^{A}(\Gamma'')$ des fonctions approchées définies par l'équation (1.12) vérifiant les conditions asymptotiques données par l'équation (2.15) .
Soient $\delta\Psi^{A}(\Gamma')$ et $\delta\Psi^{A}(\Gamma'')$ les variations de ces fonctions obtenues en faisant varier la partie radiale du développement (1.12).

Les fonctions atomiques sont supposées exactes , seules $F_{\Gamma}(\Gamma'|r_{N+1})$ et $F_{\Gamma}(\Gamma''|r_{N+1})$ varient, la forme asymptotique de leurs variations étant :

$$\delta F_{\Gamma}(\Gamma'|r_{N+1}) \sim \frac{1}{\sqrt{k_{\Gamma}}} \cos(x_{\Gamma}+\tau_{\Gamma})\delta R_{\Gamma\Gamma'} \tag{2.26}$$

On suppose que les fonctions approchées $\Psi^{A}(\Gamma')$, $\Psi^{A}(\Gamma')+\delta\Psi^{A}(\Gamma')$, $\Psi^{A}(\Gamma'')$ et $\Psi^{A}(\Gamma'')$

Un calcul identique à celui qui permet d'obtenir (2.21) donne :

(2.27)

$$K\,(\Psi^A(\Gamma'),\delta\Psi^A(\Gamma'')) = \langle \Psi^A(\Gamma')\,|H-E|\,\delta\Psi^A(\Gamma'')\rangle - \langle \delta\Psi^A(\Gamma'')\,|H-E|\,\Psi^A(\Gamma')\rangle^*$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m_e}\,\delta R_{\Gamma'\Gamma''}$$

On considère la variation :

$$\delta\left[\langle \Psi^A(\Gamma')|H-E|\,\Psi^A(\Gamma'')\rangle\right] \qquad (2.28)$$

$$\langle \delta\Psi^A(\Gamma')|H-E|\,\Psi^A(\Gamma'')\rangle + \langle \Psi^A(\Gamma')|H-E|\,\delta\Psi^A(\Gamma'')\rangle + \langle \delta\Psi^A(\Gamma')|H-E|\delta\Psi^A(\Gamma'')$$

Compte tenu de (2.27) on obtient :

$$\delta\left[\langle\Psi^A(\Gamma')\,|H-E|\,\Psi^A(\Gamma'')\rangle - \frac{\hbar^2}{2m_e}R^A{}_{\Gamma'\Gamma''}\right]$$

$$= \langle \delta\Psi^A(\Gamma')|H-E|\,\Psi^A(\Gamma'')\rangle + \langle \delta\,\Psi^A(\Gamma'')\,|H-E|\,\Psi^A(\Gamma')\rangle^* \qquad (2.29)$$

$$+ \langle \delta\,\Psi^A(\Gamma')\,|H-E|\,\delta\,\Psi^A(\Gamma'')\rangle$$

Si cette variation est nulle au premier ordre pour tout $\delta\Psi^A(\Gamma')$, $\delta\Psi^A(\Gamma'')$ alors :

$$(H-E)\Psi^A(\Gamma'') \equiv o \qquad (H-E)\,\Psi^A(\Gamma') \equiv o$$

$\Psi^A(\Gamma')$ et $\Psi^A(\Gamma'')$ sont solutions exactes.

Réciproquement, si $\Psi^A(\Gamma')$ et $\Psi^A(\Gamma'')$ sont des solutions exactes $\Psi(\Gamma')$, $\Psi(\Gamma'')$, alors pour des petites variations de ces fonctions on a :

$$\delta\left[\langle \Psi(\Gamma')|H-E|\,\Psi(\Gamma'')\rangle - \frac{\hbar^2}{2m_e}R_{\Gamma'\Gamma''}\right] = o \qquad (2.30)$$

au premier ordre.

On cherche donc des fonctions approchées telles que $\Psi^A(\Gamma')$ et $\Psi^A(\Gamma'')$ qui vérifient le principe variationnel (2.30). L'introduction de fonctions radiales non nulles à l'infini modifie , par l'introduction de terme en $R_{\Gamma'\Gamma''}$ le principe variationnel usuel pour les états liés (Chapitre I).

Soient de telles fonctions approchées $\Psi^{cal}(\Gamma')$, $\Psi^{cal}(\Gamma'')$ obtenues par un premier calcul dans lequel on a fait, par exemple, des approximations dans le hamiltonien. Supposons que ces fonctions diffèrent des fonctions exactes par de faibles quantités

$$\Psi^{exact}(\Gamma) = \Psi^{cal}(\Gamma) + \delta\Psi(\Gamma)$$

le premier membre de l'équation (2.29) sera obtenu en faisant la différence entre la quantité entre parenthèses calculée pour les fonctions exactes et les fonctions approchées :

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} R^{exact}_{\Gamma'\Gamma''} - < \Psi^{calc}(\Gamma') \mid H - E \mid \Psi^{calc}(\Gamma'') > + \frac{\hbar^2}{2m_e} R^{calc}_{\Gamma'\Gamma''} \qquad (2.31)$$

soit :

$$R^{exact}_{\Gamma'\Gamma''} = R^{calc}_{\Gamma'\Gamma''} - \frac{2m_e}{\hbar^2}\left[< \Psi^{calc}_{\Gamma'} \mid H - E \mid \Psi^{calc}(\Gamma'')> - <\delta\Psi^{calc} \mid H-E \mid \delta\Psi^{calc}(\Gamma'')>\right]$$

Une excellente estimation de la matrice R sera obtenue en négligeant le dernier terme de (2.31) quadratique en fonction des erreurs. On peut ainsi améliorer variationnellement la matrice R^{calc} en adoptant pour $R_{\Gamma'\Gamma''}$ la valeur approchée définie par :

$$R^{A}_{\Gamma'\Gamma''} = R^{calc}_{\Gamma'\Gamma''} - \frac{2m_e}{\hbar^2} < \Psi^{calc}(\Gamma') \mid H - E \mid \Psi^{calc}(\Gamma'')> \qquad (2.32)$$

L'approximation sera bonne si $R^{A}_{\Gamma'\Gamma''}$ diffère peu de $R^{calc}_{\Gamma'\Gamma''}$

a) L'approximation de couplage collisionnel consiste à ne tenir compte du couplage qu'entre un nombre fini d'états Γ. La fonction d'onde est alors calculée en ne gardant qu'un nombre fini de termes dans le développement (1.12) :

$$\Psi(\Gamma' \mid \vec{X}_i, \vec{x}_{N+1}) = \mathcal{A} \sum_{\Gamma}{}' \Phi_\Gamma(\vec{X}_i, \vec{s}_{N+1}, \hat{r}_{N+1}) \frac{1}{r_{N+1}} F^{calc}_{\Gamma}(\Gamma' \mid r_{N+1}) \qquad (2.33)$$

$\sum'$ indique que la somme est tronquée.

Pour déterminer ces fonctions $F_\Gamma^{calc}(\Gamma'|r_{N+1})$ on utilise la méthode variationnelle

$$\delta\left[< \Psi^{calc}(\Gamma')|H - E|\ \Psi^{calc}(\Gamma'') > - \frac{\hbar^2}{2m_e}\ R^{calc}_{\Gamma'\Gamma''} \right] = 0 \qquad (2.34)$$

Ce qui est équivalent à :

$$I = \int \delta\Psi^{*calc}(\Gamma')\ (H - E)\Psi^{calc}(\Gamma'')\ d\tau = 0 \qquad (2.35)$$

Compte tenu du fait que (H - E) est un opérateur symétrique par rapport à toutes les variables, que chaque variable a le même domaine d'intégration et que les fonctions $\Psi(\Gamma)$ sont antisymétriques, la contribution de chaque terme de la somme contenue dans l'antisymetriseur $\mathcal{A}$ est la même, d'où :

$$I=\sqrt{N+1}\ \sum_\Gamma{}'\int \{\ \Phi^*_\Gamma\ (\vec{X}_i,\vec{s}_{N+1},\hat{r}_{N+1})\ (H-E)\Psi^{calc}(\Gamma'')d\vec{X}_i\ d\vec{s}_{N+1}d\hat{r}_{N+1}\}$$

$$x\ \frac{1}{r_{N+1}}\ \delta F_\Gamma^{*calc}(\Gamma'|r_{N+1})\ r^2_{N+1}\ dr_{N+1} \qquad (2.36)$$

Ce qui entraîne, les $\delta F_\Gamma^{calc}(\Gamma'|r_{N+1})$ étant arbitraires,

$$\int \Phi^*_\Gamma\ (\vec{X}_i,\vec{s}_{N+1},\hat{r}_{N+1})\ (H - E)\ \Psi^{calc}(\Gamma'')\ d\vec{X}_i d\vec{s}_{N+1}d\hat{r}_{N+1} = 0 \qquad (2.37)$$

D'après le paragraphe 1 on conclut que les fonctions radiales satisfaisant le principe variationnel (2.23) vérifient le système d'équations couplées (1.19)

Le système d'équations couplées, résolu pour toutes les voies incluses dans la somme tronquée $\sum'$, donnent des fonctions $\Psi^{calc}(\Gamma)$ telles que :

$$<\Psi^{calc}(\Gamma')|H-E|\Psi^{calc}(\Gamma'')> \qquad (2.38)$$

$$=\sqrt{N+1}\ \sum_\Gamma{}'\int\Phi^*_\Gamma(\vec{X}_i,\vec{s}_{N+1},\hat{r}_{N+1})\frac{1}{r_{N+1}}\ F_\Gamma^{*calc}(\Gamma'|r_{N+1})(H-E)\Psi^{calc}(\Gamma'')\,d\tau = 0$$

Donc la matrice R, que l'on calcule en résolvant les équations couplées pour un nombre fini de voies, ne diffère, d'après (2.20), de la matrice exacte que par des termes quadratiques en fonction des erreurs sur les fonctions d'onde.

b) Dans les approximations de couplage faible, les fonctions d'onde sont calculées en faisant des approximations dans le hamiltonien de telle sorte que (voir paragraphe 3) :

$$R^{calc}_{\Gamma'\Gamma''} = 0 \text{ pour tout } \Gamma' \neq \Gamma'' \tag{2.39}$$

D'après (2.32) il s'ensuit immédiatement que :

$$R^{A}_{\Gamma'\Gamma''} = -\frac{2m_e}{\hbar^2} < \Psi^{calc}(\Gamma')|H-E|\Psi^{calc}(\Gamma'') > \tag{2.40}$$

Ayant calculé une matrice R réelle et symétrique par une méthode approchée et variationnelle, on calcule la matrice S en appliquant la relation (2.16), l'unitarité de la matrice S, c'est à dire la vérification du principe de conservation du flux, est ainsi automatiquement réalisée. Seaton (1961) a montré qu'on obtenait, en procédant ainsi, des résultats bien meilleurs que lorsqu'on applique la méthode variationnelle directement au calcul de S.

3 - Approximation de couplage faible

On cherche à résoudre de façon approchée le système d'équations couplées (1.19) dans lequel chaque fonction $F_\Gamma(\Gamma'|r_{N+1})$ dépend des autres voies Γ''. L'approximation de couplage faible consiste à négliger tous les processus $\Gamma' \to \Gamma'' \to \Gamma$ qui peuvent accompagner l'excitation $\Gamma' \to \Gamma$, tout se passe comme si le système atome-électron collisionnel ne pouvait être que dans la voie initiale ou dans la voie finale. Le système d'équations couplées de l'approximation de couplage faible se réduit à :

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2_{N+1}} - \frac{\ell_\Gamma(\ell_\Gamma+1)}{r^2_{N+1}} + \frac{2(Z-N)}{r_{N+1}} \frac{e^2 m_e}{\hbar^2} - \frac{2m_e e}{\hbar^2}(V_{\Gamma\Gamma} - W_{\Gamma\Gamma}) + k^2_\Gamma\right] F_\Gamma(\Gamma'|r_{N+1})$$

$$= \frac{2m_e e}{\hbar^2}(V_{\Gamma\Gamma'} - W_{\Gamma\Gamma'}) F_{\Gamma'}(\Gamma'|r_{N+1})$$

$$\left[\frac{d^2}{dr^2_{N+1}} - \frac{\ell_{\Gamma'}(\ell_{\Gamma'}+1)}{r^2_{N+1}} + \frac{2(Z-N)}{r_{N+1}} \frac{e^2 m_e}{\hbar^2} - \frac{2m_e e}{\hbar^2}(V_{\Gamma'\Gamma'} - W_{\Gamma'\Gamma'}) + k^2_{\Gamma'}\right] F_{\Gamma'}(\Gamma'|r_{N+1})$$

$$= \frac{2m_e e}{\hbar^2}(V_{\Gamma'\Gamma} - W_{\Gamma'\Gamma}) F_\Gamma(\Gamma' r_{N+1}) \tag{3.1}$$

Si les potentiels d'interaction entre les voies Γ et Γ' sont forts, le couplage entre les deux équations est important et il est nécessaire de résoudre le système des deux équations couplées. La résolution de ce système implique encore des calculs longs et dans certains cas, on peut faire d'autres approximations qui permettent de le simplifier.

3 - 1 - Approximation des ondes déformées (distorted wave approximation)

Cette approximation consiste à découpler le système d'équations (3.1) en supposant que $V_{\Gamma\Gamma'} = V_{\Gamma'\Gamma} = W_{\Gamma\Gamma'} = W_{\Gamma'\Gamma} = 0$

De plus, les fonctions d'onde notées $\Psi^{D.W}$ sont calculées en utilisant un potentiel central. Ainsi dans le programme général de Eissner (1971), les fonctions radiales approchées $F_{\Gamma}^{D.W}(\Gamma'|r_{N+1})$ sont construites à partir des solutions $F_{k_\Gamma \ell_\Gamma}(r_{N+1})$ de l'équation :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}_{N+1} - \frac{\ell_\Gamma(\ell_\Gamma+1)}{r^2_{N+1}} + \frac{2m_e}{\hbar^2} e\, V(r_{N+1},\lambda_{\ell_\Gamma}) + k_\Gamma^2 \right] F_{k_\Gamma \ell_\Gamma}(r_{N+1}) = 0 \qquad (3.2)$$

où le potentiel $V(r_{N+1}, \lambda_\ell)$ est le potentiel statistique de Thomas Fermi (voir chapitre I) pour un atome à N+1 électrons qui vérifie les conditions aux limites :

$$\lim_{r_{N+1} \to \infty} V(r_{N+1},\lambda_\ell) = e\,\frac{(Z-N)}{r_{N+1}}$$

$$\lim_{r_{N+1} \to 0} V(r_{N+1},\lambda_\ell) = e\,\frac{Z}{r_{N+1}}$$

Ce potentiel central est une forme approchée du potentiel

$$e\,\frac{(Z-N)}{r_{N+1}} - (V_{\Gamma\Gamma} - W_{\Gamma\Gamma})$$

qui tient compte, à faibles distances, de la déformation du champ coulombien due aux potentiels à courte portée $(V_{\Gamma\Gamma} - W_{\Gamma\Gamma})$. Ceci justifie la dénomination d'approximation des ondes déformées.

3 - 2 Approximation de Born et de Coulomb Born

Les approximations de Born et de Coulomb Born sont le résultat de la même approximation faite respectivement dans le cas des atomes neutres et dans le cas des ions. Il suffira de faire $\xi_\Gamma = 0$ dans les résultats établis pour les ions pour obtenir le cas de l'atome neutre.
Comme dans l'approximation des ondes déformées , on néglige tout couplage entre les différentes voies du système mais on néglige en plus le potentiel électrostatique $V_{\Gamma\Gamma}$ devant le potentiel coulombien.

Si on ne tient pas compte de l'échange, la solution régulière à l'origine de l'équation obtenue en faisant dans l'équation (3.2)

$$V\ (r_{N+1}, \lambda_{\ell_\Gamma}) = \frac{(Z-N)e}{r_{N+1}}$$

est l'onde coulombienne régulière $F^c_{k_\Gamma \ell_\Gamma}(r_{N+1})$ dont la forme asymptotique est :

$$F^{\infty c}_{k_\Gamma \ell_\Gamma}(r_{N+1}) \quad k_\Gamma^{-1/2} \sin x_\Gamma \tag{3.8}$$

Dans ce cas, les fonctions d'onde approchées $\Psi^{CB}(\Gamma)$, fonctions propres du hamiltonien approché H' tel que :

$$H - H' \equiv eU_1 \tag{3.9}$$

s'écrivent :

$$\Psi^{CB}(\Gamma' | \vec{X}_i, \vec{x}_{N+1}) = \Phi_{\Gamma'}(\vec{X}_i, \vec{s}_{N+1}, \hat{r}_{N+1}) \frac{1}{r_{N+1}} F^c_{k_{\Gamma'}, \ell_{\Gamma'}}(r_{N+1}) \tag{3.10}$$

Dans l'approximation de Coulomb Born sans échange, les fonctions d'onde approchées pour l'électron collisionnel sont des ondes coulombiennes après comme avant la collision.

L'élément de matrice $R^{CB}_{\Gamma'\Gamma''}(0)$ s'exprime simplement d'après (3.6) par :

$$R^{CB}_{\Gamma'\Gamma''}(0) = \frac{2m_e}{\hbar^2} \int_0^\infty F^c_{k_\Gamma \ell_\Gamma}(r_{N+1})\ V_{\Gamma\Gamma'}\ F^c_{k_{\Gamma'}, \ell_{\Gamma'}}(r_{N+1})\ dr_{N+1} \tag{3.11}$$

Comme dans l'approximation des ondes déformées , on doit naturellement vérifier que $R^{CB}_{\Gamma'\Gamma''}(0) \ll 1$.

4 - Expression de la section de choc en terme des éléments de la matrice S

4 - 1 - Définition de la section de choc et taux de collision

La section efficace ou section de choc différentielle, qui représente le flux diffusé de particules par un atome, par unité d'angle solide, dans la direction $\hat{k}_\alpha$ rapporté au flux incident $\frac{\hbar \vec{k}_{\alpha'}}{m_e}$, est donnée par la formule suivante :

$$\sigma(\alpha' m_s, \hat{k}_{\alpha'} \rightarrow \alpha m_s \hat{k}_\alpha) = \frac{k_\alpha}{k_{\alpha'}} \left| f_{\alpha' m_s, \rightarrow \alpha m_s}(\hat{k}_{\alpha'}, \hat{k}_\alpha) \right|^2 \qquad (4.1)$$

la section efficace totale s'obtient en intégrant dans toutes les directions de diffusion $\hat{k}_\alpha$:

$$Q(\alpha' m_s, \vec{k}_{\alpha'} \rightarrow \alpha m_s) = \int \sigma(\alpha' m_s, \hat{k}_{\alpha'} \rightarrow \alpha m_s \hat{k}_\alpha) \, d\hat{k}_\alpha$$

si l'on considère toutes les orientations du spin de l'électron diffusé, on a :

$$Q(\alpha' m_s \vec{k}_{\alpha'} \rightarrow \alpha) = \sum_{m_s=-1/2}^{+1/2} \int \sigma(\alpha' m_s, \hat{k}_{\alpha'} \rightarrow \alpha m_s \hat{k}_\alpha) d\hat{k}_\alpha$$

En outre, pour l'électron incident, si les deux orientations du spin sont également probables, on doit faire une moyenne sur les spins incidents :

$$Q(\alpha' \vec{k}_{\alpha'} \rightarrow \alpha) = \frac{1}{2} \sum_{m_{s'}=-\frac{1}{2}}^{+1/2} Q(\alpha' m_{s'}, \vec{k}_{\alpha'} \rightarrow \alpha)$$

Si de plus la direction de l'électron incident n'est pas précisée, ce qui est le cas général en astrophysique (voir remarque de la page 39), on doit faire également une moyenne sur les directions incidentes pour obtenir la section efficace totale de la transition $\alpha' \rightarrow \alpha$

$$Q(\alpha' \rightarrow \alpha) = \frac{k_\alpha}{k_{\alpha'}} \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi} \sum_{m_s \, m_{s'}} \int \left| f_{\alpha' m_{s'} \rightarrow \alpha m_s}(\hat{k}_{\alpha'}, \hat{k}_\alpha) \right|^2 d\hat{k}_\alpha d\hat{k}_{\alpha'} \qquad (4.2)$$

Pour des électrons ayant une distribution normalisée des vitesses $f(v_{\alpha'})$ et une densité N_e , la probabilité par unité de temps,ou taux de collision, pour que l'atome passe de l'état initial α' d'énergie $E_{\alpha'}$, à l'état final α d'énergie $E_\alpha > E_{\alpha'}$ est :

$$N_e\, C(\alpha' \to \alpha) = N_e \int_{v_{lim}}^{\infty} f(v_{\alpha'})\, v_{\alpha'}\, Q(\alpha' \to \alpha)\, dv_{\alpha'} \qquad (4.3)$$

La limite inférieure de l'intégration est telle que l'énergie cinétique des électrons soit suffisante pour exciter l'atome de l'état α' à l'état α:

$$V_{lim}^2 = \frac{2(E_\alpha - E_{\alpha'})}{m_e} = \frac{2\Delta E}{m_e}$$

$C(\alpha' \to \alpha)$ est le coefficient d'excitation induite par collisions électroniques.

Il est commode d'exprimer la section efficace $Q(\alpha' \to \alpha)$ en fonction de la force de collision $\Omega\ (\alpha' \to \alpha)$, qui est symétrique

$\Omega\ (\alpha' \to \alpha) = \Omega(\alpha \to \alpha') = \Omega(\alpha,\alpha')$, comme on le verra plus loin :

$$Q(\alpha' \to \alpha) = \frac{1}{k_{\alpha'}^2\, g_{\alpha'}}\, \Omega\ (\alpha,\alpha') \qquad (4.4)$$

Dans cette expression $Q(\alpha' \to \alpha)$ est en unités de $\pi a_0^2 = 8.8\ 10^{-17}\ cm^2$, $k_{\alpha'}^2$, est numériquement égal à l'énergie cinétique exprimée en Rydberg, $\Omega(\alpha,\alpha')$ est un nombre sans dimensions.
Si la distribution des vitesses est maxwellienne, le coefficient d'excitation exprimé en $cm^3\, s^{-1}$,peut se mettre sous la forme :

$$C(\alpha' \to \alpha) = \frac{8.63\ 10^{-6}}{g_{\alpha'}\ \sqrt{T_e}} \int_{\frac{\Delta E}{kT_e}}^{\infty} \Omega\ (\alpha,\alpha')\, \exp\left(-\frac{E_{\alpha'}}{k\ T_e}\right)\, d\left(\frac{E_{\alpha'}}{k\ T_e}\right) \qquad (4.5)$$

Le coefficient de désexcitation $C\ (\alpha \to \alpha')$ est donné par :

$$C(\alpha \to \alpha') = \frac{8.6310^{-6}}{g_\alpha\ \sqrt{T_e}} \int_0^{\infty} \Omega(\alpha,\alpha')\ e^{-\frac{E_\alpha}{k\ Te}}\, d\left(\frac{E_\alpha}{kT_e}\right) \qquad (4.6)$$

Grâce à la symétrie de la force de collision $\Omega(\alpha,\alpha')$ on déduit la relation :

$$C(\alpha \to \alpha') = \frac{g_{\alpha'}}{g_{\alpha}} \; C(\alpha' \to \alpha) \; e^{\frac{\Delta E}{kT_e}} \qquad (4.7)$$

Cette relation assure que la population des niveaux atomiques est boltzmanienne quand les processus de collisions sont les processus prédominants.

4 - 2 - Expression de la section de choc en terme de la matrice S.

En représentation γ la matrice S a été définie par la forme asymptotique de la fonction radiale $F_\gamma(r_{N+1})$:

$$F_\gamma^\infty(\gamma'|r_{N+1}) = \frac{1}{\sqrt{k_\gamma}} \left[\delta_{\gamma\gamma'}(e^{-ix_\gamma} - e^{+ix_\gamma}) + T_{\gamma\gamma'} e^{ix_\gamma} \right] \qquad (4.8)$$

$$\text{ou} \quad T_{\gamma\gamma'} = \delta_{\gamma\gamma'} - S_{\gamma\gamma'} \qquad (4.9)$$

est un élément de la matrice de transition.
Le comportement asymptotique de la fonction totale est alors :

$$\sqrt{N+1}\,\Psi^\infty(\gamma'|\vec{X}_i, \vec{x}_{N+1}) = \Psi_{\alpha'}(\vec{X}_i)\,\chi(\tfrac{1}{2}, m_s)\,\frac{\gamma'}{r_{N+1}\sqrt{k_\gamma}}\left[e^{-ix_{\gamma'}} - e^{ix_{\gamma'}}\right]$$
$$+ \sum_\gamma \Psi_\alpha(\vec{X}_i)\chi(\tfrac{1}{2}, m_s)\, Y_\ell^{m_\ell}(\hat{r}_{N+1})\,\frac{1}{r_{N+1}\sqrt{k_\gamma}}\, T_{\gamma\gamma'} e^{ix_\gamma} \qquad (4.10)$$

Pour trouver l'expression de l'amplitude de diffusion en fonction de la matrice S, il faut trouver la relation entre la forme asymptotique précédente déduite d'un calcul mathématique et la forme asymptotique (2.6) obtenue par un raisonnement physique.
Pour cela, on développe l'onde coulombienne Φ^c en ondes partielles :

$$\Phi^c = \frac{2\pi}{k_\gamma r_{N+1}} \sum_{\ell m_\ell} i^{(\ell+1)}\, e^{i\sigma_\ell}\, Y_\ell^{m_\ell *}(\hat{k}_\alpha) Y_\ell^{m_\ell}(\hat{r}_{N+1}) \left[e^{-ix_\gamma} - e^{+ix_\gamma}\right] \qquad (4.11)$$

En reportant ce développement dans (2.6) et en comparant à (4.10), on trouve :

$$-f^{c}(\theta)\delta(\alpha m_s,\alpha' m_s') + f_{\alpha' m_s \to \alpha m_s}(\hat{k}_\alpha,\hat{k}_{\alpha'})$$

$$= \frac{2i\,\Pi}{\sqrt{k_\gamma k_{\gamma'}}} \sum_{\substack{\ell m_\ell \\ \ell' m_{\ell'}}} i^{\ell'-\ell}\, e^{i(\sigma_{\ell'}+\sigma_\ell)}\, Y_\ell^{m_\ell}(\hat{k}_\gamma)\, Y_{\ell'}^{m_{\ell'}}(\hat{k}_{\gamma'})\, T_{\gamma\gamma'} \qquad (4.12)$$

L'amplitude de diffusion élastique est égale à l'amplitude de diffusion coulombienne, plus un terme dû au fait que le potentiel n'est pas tout à fait coulombien. La section coulombienne intégrée diverge, par conséquent la section de choc élastique diverge dans le cas des ions, pour les atomes neutres, l'expression (4.12) permet d'obtenir la section de choc élastique totale.

Compte tenu de la relation d'orthonormalisation des harmoniques sphériques, la section de choc totale inélastique relative à la transition $\alpha' \to \alpha$ de l'atome est :

$$Q(\alpha' \to \alpha) = \frac{\Pi}{2\,k_{\alpha'}^2} \sum_{\substack{\ell' m_{\ell'} m_{s'} \\ \ell m_\ell\, m_s}} |\, T_{\gamma\gamma'}\,|^2 \qquad (4.13)$$

Un niveau atomique d'énergie E_α(a S L) étant (2L+1)(2S+1) fois dégénéré , pour trouver la section de choc pour des collisions faisant passer l'atome d'un niveau d'énergie $E_{\alpha'}$(a'S'L') à un niveau d'énergie E_α(a S L), on doit sommer sur tous les sous niveaux Zeeman possibles de l'état final et faire une moyenne sur les sous niveaux Zeeman possibles de l'état initial :

$$Q\,(a'S'L' \to aSL) = \frac{\Pi}{2\,k_{\alpha'}^2} \frac{1}{(2L'+1)(2S'+1)} \sum_{\substack{\ell m_\ell, m_{s'} \\ \ell m_\ell\, m \\ M_{L'}, M_{S'} \\ M_L\, M_S}} |\, T_{\gamma\gamma'}\,|^2 \qquad (4.14)$$

La section de choc est indépendante de la représentation utilisée, or d'après la relation (2.14), la matrice S, dans la représentation Γ est diagonale en L^T, S^T, M_{LT}, M_{ST} ; l'utilisation de la représentation Γ permet donc de diminuer le nombre d'indices dans la sommation précédente :

$$Q(a'S'L' \to aSL) = \frac{\Pi}{2\, k_{\alpha'}^2\, (2L'+1)(2S'+1)} \sum_{\substack{\ell\ell' \\ S^T L^T \\ M_{LT}\ M_{ST}}} |T_{\Gamma\Gamma'}|^2 \qquad (4.15)$$

Comme la matrice S est indépendante de M_{LT} et M_{ST}, on obtient finalement :

$$Q(a'S'L' \to aSL) = \frac{\Pi}{2\, k_{\alpha'}^2\, (2L'+1)(2S'+1)} \sum_{\substack{\ell\ell' \\ S^T\ L^T}} (2S^T+1)(2L^T+1) |\ T_{\Gamma\Gamma'}|^2 \qquad (4.16)$$

$g_{\alpha'} = (2L'+1)(2S'+1)$ est le poids statique du niveau initial
d'où :

$$\Omega\ (a'S'L', aSL) = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\ell\ell' \\ S^T L^T}} (2S^T+1)(2L^T+1) |\ T_{\Gamma\Gamma'}\ |^2 \qquad (4.17)$$

Pour les transitions inélastiques $T_{\Gamma\Gamma'} = S_{\Gamma\Gamma'}$ donc la force de collision $\Omega(a'L'S', aLS)$ représente la probabilité de transition pour que l'atome passe de l'état a'L'S' à l'état aLs.

D'après la définition (4.9) des éléments de la matrice T, cette matrice est symétrique

$$T_{\Gamma\Gamma'} = T_{\Gamma'\Gamma} \qquad (4.18)$$

Comme de plus au cours de la collision S^T et L^T sont conservés, la relation (4.17) implique que la force de collision est symétrique pour une énergie totale donnée. Il en résulte que la probabilité d'excitation de l'état a'L'S' à l'état aLS est égale à la probabilité du processus inverse, ce qui exprime la microréversibilité du processus de collision

$$k_{\alpha'}^2\, g_{\alpha'}\, Q(a'L'S' \to aLS) = k_{\alpha}^2\, g_{\alpha}\, Q(aLS \to a'L'S') \qquad (4.19)$$

Ayant calculé les éléments de la matrice R, on obtient les éléments de la matrice T au moyen de la relation exacte (Seaton 1961),

$$T = \frac{2iR}{I-iR} \qquad (4.20)$$

Si tous les éléments de la matrice R sont tels que $|R_{\Gamma\Gamma'}| \ll 1$, la relation (4.18) devient :

$$T = -2iR \qquad (4.21)$$

Dans les approximations de couplage faible lorsque les éléments de la matrice T sont calculés suivant la formule (4.21), l'approximation est notée I. Lorsqu'on utilise la relation (4.20) pour calculer les éléments de la matrice T à partir des éléments de la matrice R obtenus dans les approximations de couplage faible, ces approximations sont notées II. On tient compte ainsi de tous les élements non négligeables de la matrice R, c'est à dire, qu'on inclut, de façon très approchée (cf. page 87), les effets de couplage dans le calcul des sections de choc, bien qu'ils aient été ignorés dans le calcul des fonctions d'onde.

4.3 Expression de la section de choc entre niveaux de structure fine.

Pour résoudre les équations de l'équilibre statistique, on a besoin de connaître les sections efficaces entre les niveaux J-J' de l'atome.

Pour calculer les forces de collision correspondantes, à partir des éléments de matrice R calculés en couplage LS, deux sortes de transformations doivent être faites suivant le type de couplage valable pour l'atome.

Tout d'abord on doit passer de la représentation $SL\,s\ell\,S^TL^T$ à la représentation $SL\,Js\ell jJ^T$ du couplage Jj par une transformation algébrique unitaire

$$\Psi\,(SL(J)s\ell(j)J^T) = \sum_{S^TL^T} < Jj\ ;\ J^T \mid S^TL^T\ ;\ J^T > \Psi\,(Ss(S^T)L\ell(L^T)J^T)$$

les coefficients de cette transformation sont reliés aux coefficients 9j de Wigner donnés dans De Shalit et Talmi (1963)

$$<Jj\ ;\ J^T \mid S^TL^T\ ;\ J^T> = \sqrt{(2J+1)(2j+1)(2S^T+1)(2L^T+1)} \begin{Bmatrix} S & s & S^T \\ L & \ell & L^T \\ J & j & J^T \end{Bmatrix}$$

Les éléments de la matrice R dans la représentation S L J s ℓ j J^T se déduisent des éléments de la matrice R calculés en couplage LS suivant :

$$R^{J^T}(a\,SLJs\ell j,\ a'S'J's\ell'j')$$

$$= \sum_{S^TL^T} \langle S^TL^T\ ;\ J^T \mid Jj\ ;\ J^T \rangle R^{S^TL^T}(a\,SL\ s\ell, a'S'L's\ell')\langle J'j'\ ;\ J^T \mid S^TL^T\ ;\ J^T \rangle$$

Pour des atomes comme OV, pour lesquels le couplage LS est valable, c'est-à-dire, dans lesquels la séparation des niveaux de structure fine est faible devant la séparation des termes, les forces de collision s obtiennent simplement en fonction des éléments de matrice $T^{J^T}(a\,SLJjs\ell\ j,\ a'S'L'J's\ell'j')$.

$$\Omega(aSLJ - a'S'L'J') = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\ell\ell' \\ jj'J^T}} (2J^T + 1) \mid T^{J^T}(a\,SLJj\ s\ell j, a'S'L'J's\ell'j') \mid^2 \qquad (4.22)$$

Quand la charge nucléaire augmente, l'interaction spin orbite devient importante, et l'atome est représenté par une fonction d'onde en couplage intermédiaire suivant le relation (3.9) du chapitre I

$$\psi(J) = \sum_{SL} c_J(aSL)\ \psi(a\ S\ L\ J)$$

Ces mêmes coefficients de couplage intermédiaire sont utilisés pour transformer les éléments de la matrice R :

$$R^{J^T}(J\ s\ell j,\ J's\ell'j') = \sum_{\substack{SL \\ S'L'}} c_J(a\ SL)\ R^{J^T}(aSLJs\ell j,\ a'S'L'J's\ell'j')c_{J'}(a'S'L')$$

les forces de collision entre niveaux de structure fine sont ensuite donnés par :

$$\Omega\ (J - J') = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\ell\ell' \\ jj'J^T}} (2\ J^T+1) \mid T^{J^T}(Js\ell j,\ J's\ell'j') \mid^2 \qquad (4.23)$$

Des programmes de calculs écrits par Saraph (1972) réalisent automatiquement ces transformations suivant le type de couplage atomique.

5. Conditions de validité des approximations de couplage faible.

Les approximations de couplage faible supposent que les potentiels directs et d'échange négligés sont faibles devant

$$\frac{\ell\,(\ell+1)}{r^2} - \frac{2m_e}{\hbar^2}\,\frac{(Z-N)e^2}{r} - k^2$$

Ceci sera d'autant mieux vérifié que l'énergie cinétique ou le terme centrifuge ou encore le terme coulombien seront grands devant l'énergie d'interaction électronique.

Dans le cas des ions coronaux fortement ionisés l'interaction coulombienne à longue portée est largement prédominante, et permet de considérer toutes les autres interactions comme de faibles perturbations. Les approximations de Coulomb Born et des ondes déformées seront valables même pour de faibles énergies, au voisinage du seuil d'excitation de la transition considérée. L'excellent accord obtenu par Petrini (1969) (1% environ) pour l'ion Fe XIV, entre les forces de collision calculées dans l'approximation de couplage collisionnel et dans l'approximation de Coulomb Born I, en constitue une preuve.

Dans le cas général il faut comparer l'importance relative des différents potentiels.

En mécanique classique l'électron de vitesse initiale v_α, et de moment angulaire $L_\alpha' = mv_\alpha,\rho$, où ρ est le paramètre d'impact se déplace sur une trajectoire. La distance de plus courte approche r_c est donnée par

$$\frac{L_\alpha'^2}{2m_e r_c^2} - \frac{(Z-N)e^2}{r_c} = \frac{1}{2}\,m_e v_\alpha^2,$$

Au moment angulaire classique L_α, on peut faire correspondre un moment angulaire quantique

$$L_\alpha, = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)} \qquad (5.1)$$

La fonction d'onde radiale de l'électron collisionnel sera petite pour toute distance $r < r_c$.

Pour les atomes neutres :

$$r_c = \frac{\sqrt{\ell(\ell+1)}}{k} \qquad (5.2)$$

alors que pour les ions, à faible énergie,

$$r_c \simeq \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m_e(Z-N)e^2} \qquad (5.3)$$

Le potentiel d'interaction étant négligeable au-delà de son rayon d'action b, seuls les électrons ayant une distance de plus courte approche

$$r_c < b \qquad (5.4)$$

seront affectés par ce potentiel.

On classe donc les transitions suivant la portée des potentiels d'interaction ($V_{\Gamma\Gamma'}$, - $W_{\Gamma\Gamma'}$,). L'élémnt de matrice $T_{\Gamma\Gamma'}$ dépend de la grandeur de l'interaction dans la région où les fonctions d'onde ont des valeurs notables.

5.1. Transitions avec changement de spin de l'atome

Les transitions entre niveaux de l'atome de spins différents dépendent uniquement du potentiel d'échange. Or la portéede ce potentiel est de l'ordre de grandeur des dimensions atomiques. L'électron collisionnel doit pénétrer l'atome pour que l'échange avec un électron atomique puisse se produire.

Aux faibles énergies, un petit nombre d'ondes partielles, souvent une ou deux, correspondant à de petites valeurs de ℓ, contribue à la section de choc. Lors de ces collisions proches l'électron reste plus longtemps près de l'atome, les interactions sont très fortes et les fonctions d'onde sont très sensibles à la forme exacte du potentiel près de l'atome. C'est pourquoi l'approximation de Coulomb Born avec échange, qui suppose que la fonction d'onde de l'électron collisionnel est partout une onde coulombienne, n'est pas valable à faible énergie ;par contre, l'approximation des ondes déformées qui tient compte de la déformation de la fonction d'onde par le champ statique de l'atome est probablement meilleure. Aux grandes énergies des effets d'interférence font que les sections de choc pour des transitions avec changement de spin de l'atome deviennent très petites.

5.2. Transitions sans changement du spin de l'atome.

Pour ces transitions on considère le potentiel direct $V_{\Gamma\Gamma'}$. Pour les transitions radiativement permises (dipolaires électriques), c'est le terme dipolaire ($\lambda = 1$) qui est prépondérant dans le développement

multipolaire (1.19) de $\sum_{i=1}^{N} \frac{1}{r_{ij}}$. La forme asymptotique du potentiel d'interaction est en $(1/r_{N+1}^2)$.

Pour les transitions radiativement interdites pour lesquelles $\Delta\ell = 0, \pm 2$ c'est le terme quadrupolaire $\lambda = 2$ qui contribue au développement (1.19), le potentiel d'interaction se comporte comme $(1/r_{N+1}^3)$ aux grandes valeurs de r. Le potentiel d'interaction dans le cas de transitions permises étant à plus longue portée que le potentiel d'interaction responsable des transitions interdites, pour une énergie donnée, il faudra sommer sur un plus grand nombre d'ondes partielles pour obtenir la force de collision des transitions permises. Cette remarque sera reprise dans la discussion de la validité de l'approximation semi-classique. A grande énergie, pour les transitions permises, la contribution la plus forte à la force de collision provient des ondes partielles associées aux grandes valeurs de ℓ pour lesquelles les collisions proches n'interviennent pas. L'électron reste toujours extérieur à l'atome et dans le développement multipolaire (1.19) on a $r_> = r_{N+1}$. Le calcul des éléments de la matrice R dans l'approximation de Coulomb Born se simplifie alors considérablement. Si de plus on calcule les éléments de matrice T en utilisant la formule (4.21) on obtient l'approximation de Bethe dans laquelle la section de choc s'exprime simplement en fonction de la force d'oscillateur de la transition et d'un facteur de Gaunt G dont on connaît des formes analytiques :

$$Q(a'S'L' \to aSL) = \frac{8\pi}{\sqrt{3}} \frac{1}{k_{\alpha'}^2} \frac{I_H}{E_{aSL} - E_{a'S'L'}} f(aSL \to a'S'L') G(k_\alpha, k_{\alpha'}) \pi a_o^2 \qquad (5.5)$$

Les approximations de couplage faible seront donc valables à grandes énergies quel que soit le type de la transition considérée.

Pour des énergies voisines du seuil de la transition étudiée la situation est différente selon qu'il s'agit d'atomes neutres ou d'atomes ionisés

En effet suivant (5.2) et (5.4) pour les atomes neutres, très près du seuil, une ou deux ondes partielles seulement correspondant à de petits moments cinétiques, contribuent à la section de choc. Pour décrire ces collisions proches il est nécessaire de faire des calculs élaborés.

Dans le cas des ions, d'après (5.3) et (5.4), même au seuil, un plus grand nombre d'ondes partielles apportent une contribution à la section de choc. Il arrive souvent, au moins quand la transition s'effectue sans changement de spin de l'ion, que les contributions dominantes proviennent d'ondes partielles correspondant à des grandes valeurs de ℓ,

pour lesquelles les approximations de couplage faible sont souvent valables, et en particulier l'approximation semi classique qui sera traitée au paragraphe suivant.

Cependant, lorsque les potentiels d'interaction négligés dans les approximations de couplage faible sont importants, même pour des ondes partielles de moments cinétiques élevés, il n'est pas possible d'ignorer le couplage. C'est le cas de la transition permise 2s-3p de l'ion N V dans laquelle la plus forte contribution à la section de choc près du seuil provient des ondes partielles L^T = 4, 5, 6. Pour cet ion moyennement ionisé, l'interaction coulombienne d'une part, et le terme centrifuge, même pour des valeurs élevées de ℓ, d'autre part, ne sont pas suffisamment grands pour qu'on puisse négliger devant eux les forts potentiels d'interaction à longue portée entre les niveaux 3s, 3p, 3d très voisins.

La comparaison entre les forces de collision déduites de la résolution des équations couplées pour les cinq niveaux 2s,2p,3s,3p,3d de NV et les forces de collision déduites des approximations de couplage faible, faite par Burke et al (1966), Henry (1974) et Hayes (1975), met en évidence l'importance d'un tel couplage collisionnel au voisinage du seuil de la transition 2s - 3p.

L'effet de ce couplage est d'augmenter de 60 % la force de collision comme on peut le voir dans le tableau suivant, tiré de Hayes (1975), dans lequel on a ajouté la valeur S.C. pour comparaison :

N V Ω(2s-3p)	pour k^2 = 6 Ryd
C B I sans échange	0.125
C B II sans échange	0.118
D W II avec échange	0.122
S C sans échange	0.328
C C sans échange	0.196
C C avec échange	0.191

La faible correction introduite par l'utilisation de l'approximation II dans le calcul des éléments de la matrice T montre, comme le soulignent Burke et al (1966), que l'approximation II ne tient pas compte correctement du couplage mais ne sert en fait qu'à assurer la conservation du flux de particules.

Il est fort probable qu'un effet du même type intervient dans le calcul de la force de collision de la transition 2s - 3p de l'ion O V (voir article 3); les niveaux 3s, 3p, 3d de cet ion sont, comme dans le cas de l'ion N V, très proches l'un de l'autre ainsi que le montre le tableau suivant :

	ΔE_{Ryd}(3s-3p)	ΔE_{Ryd}(3p-3d)	ΔE_{Ryd}(2s-3p)
N V	0.197	0.059	4.36
O V	0.174	0.319	5.29

et les forces de collision entre ces niveaux sont respectivement égales à 9.0 pour la transition 2s3s - 2s3p et 18 pour la transition 2s3p -2s 3d de OV, c'est à dire beaucoup plus grande que la force de collision pour la transition $2s^2$ - 2s3p qui est de 0.14.

Il faut d'ailleurs remarquer que pour la transition 2s-3p de OV, l'approximation semi-classique donne une force de collision quatre fois plus grande que l'approximation des ondes déformées (DW II) avec échange. Comme le rapport des intensités observées des raies 2s-3p et 2s-2p est proportionnel au rapport des taux de collision électroniques, la comparaison entre la valeur calculée et la valeur observée de ce rapport, conduit à conclure que la force de collision de la transition 2s-3p est surement sous estimée par un facteur d'environ deux dans l'approximation des ondes déformées (DW II) avec échange. (Cf article 3).

En conclusion, puisque, dans les conditions coronales l'énergie cinétique des électrons est voisine des seuils d'excitation des transitions, il faut utiliser les approximations de couplage faible avec prudence, bien qu'en règle générale, pour des ions fortement ionisés, leur emploi soit justifié.

6. - Approximation semi classique

Dans cette approximation on traite l'atome comme un système quantique et l'électron incident comme une particule classique se déplaçant sur une trajectoire, c'est-à-dire que ses coordonnées en fonction du temps sont bien déterminées. Comme on suppose, de plus, que la trajectoire de l'électron incident n'est pas affectée par la collision, cette trajectoire est une droite si l'atome rayonnant est neutre, une hyperbole, déterminée par le champ coulombien de l'ion, si l'atome rayonnant est ionisé.

L'énergie de l'électron incident étant fixée, chaque trajectoire peut être caractérisée par son paramètre d'impact ρ, défini comme la distance de l'atome à la droite portant la vitesse $\vec{v}_{\alpha'}$ de l'électron incident. A ce paramètre d'impact ρ est associé un moment cinétique orbital auquel correspond le nombre quantique orbital ℓ tel que :

$$m\, v_{\alpha'}\, \rho = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1)}$$

soit

$$\rho = \frac{\sqrt{\ell(\ell+1)}}{k_{\alpha'}} \qquad (6.1)$$

Supposer que la trajectoire n'est pas modifiée lors de la collision, revient à supposer que l'énergie et le moment cinétique de l'électron incident sont conservés. Ceci implique, d'une part, que l'énergie cinétique de l'électron incident soit grande devant la variation d'énergie $\Delta E = E_{\alpha'} - E_{\alpha}$ de l'atome, d'autre part, que le moment cinétique de l'électron incident soit grand devant le moment orbital de l'atome avant et après la collision. De cette hypothèse, il résulte que l'énergie totale et le moment angulaire total du système ne sont pas conservés, néanmoins on peut considérer qu'ils le sont au premier ordre, si les variations d'énergie et de moment angulaire de l'atome sont petites devant l'énergie totale et le moment angulaire total.

De plus, comme l'électron collisionnel est considéré comme une particule classique, l'échange est un processus physique distinct totalement négligé dans cette approximation.

6 - 1 Matrice de diffusion S semi-classique

En présence de l'électron collisionnel perturbateur dont le champ électrostatique agit sur l'atome, le hamiltonien du système total s'écrit :

$$H(\vec{X}_i, \vec{r}_{N+1}, t) = H_{atome}(\vec{X}_i) + e\, V(\vec{X}_i, \vec{r}_{N+1}(t)) \qquad (6.2)$$

ou $V(\vec{X}_i, \vec{r}_{N+1}(t))$ est le potentiel électrostatique d'interaction entre l'électron perturbateur et l'atome

$$V(\vec{X}_i, r_{N+1}(t)) = -\frac{Ze}{r_{N+1}} + \sum_{i=1}^{N} \frac{e}{|\vec{r}_i - \vec{r}_{N+1}|} \qquad (6.3)$$

Les fonctions propres de ce hamiltonien sont solutions de l'équation de Schrödinger dépendant du temps

$$H(\vec{X}_i, \vec{r}_{N+1}, t)\, \Psi(\vec{X}_i, \vec{r}_{N+1}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left[\Psi(\vec{X}_i, \vec{r}_{N+1}, t) \right] \qquad (6.4)$$

On développe les fonctions d'onde du système total sur la base des fonctions propres atomiques :

$$\Psi(\alpha' | \vec{X}_i, \vec{r}_{N+1}, t) = \sum_{\alpha''} c_{\alpha''}(\alpha' | t)\, \psi_{\alpha''}(\vec{X}_i)\, e^{-\frac{i}{\hbar} E_{\alpha''} t} \qquad (6.5)$$

l'indice α' indique qu'avant le passage du perturbateur au temps $t = -\infty$ l'atome se trouvait dans l'état non perturbé α'.

En substituant ce développement dans l'équation de Schrödinger (6.4) on trouve, après multiplication par $\psi^*_{\alpha}(\vec{X}_i) e^{\frac{i}{\hbar} E_{\alpha} t}$ et intégration sur tout l'espace,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left[c_{\alpha}(\alpha' | t) \right] = \sum_{\alpha''} c_{\alpha''}(\alpha' | t)\, V_{\alpha\alpha''}(t)\, e^{\frac{i}{\hbar}(E_{\alpha} - E_{\alpha''})t} \qquad (6.6)$$

ou

$$V_{\alpha\alpha''}(t) = e \int \psi^*_{\alpha}(\vec{X}_i)\, V(\vec{X}_i, \vec{r}_{N+1}(t))\, \psi_{\alpha''}(\vec{X}_i)\, d\vec{X}_i$$

Les coefficients $c_{\alpha''}(\alpha'|t)$ sont solutions d'un système couplé d'équations différentielles du premier ordre. Ce système d'équations est l'équivalent semi classique, pour ℓ grand, du système couplé d'équations différentielles du second ordre (1.18) de la théorie quantique sans échange. La résolution de ce système conduit aux éléments de la matrice S semi classique.

A l'instant $t = -\infty$, l'atome étant dans l'état initial α', la probabilité pour que, sous l'effet de la perturbation causée par le passage d'un électron de vitesse $\vec{v}_{\alpha'} = \vec{v}_{\alpha''} = \vec{v}$ se déplaçant sur une trajectoire de paramètre d'impact ρ, l'atome se trouve à l'instant t dans l'état α'' est

$$P_{\alpha' \to \alpha''}(t, -\infty, \rho, v) = \left| \langle \psi_{\alpha''}(\vec{X}_i) e^{-\frac{i}{\hbar} E_{\alpha''} t} \mid \Psi(\alpha' | \vec{X}_i, \vec{r}_{N+1}, t) \rangle \right|^2 \tag{6.7}$$

$$= \left| c_{\alpha''}(\alpha' | t, \rho, v) \right|^2$$

la probabilité pour que l'atome se retrouve après la collision, à l'instant $t = +\infty$ dans l'état final α est donc :

$$P_{\alpha' \to \alpha}(+\infty, -\infty, \rho, v) = \left| c_{\alpha}(\alpha' | +\infty, \rho, v) \right|^2 \tag{6.8}$$

Avec les conditions initiales :

$$c_{\alpha''}(\alpha' | -\infty, \rho, v) = \delta(\alpha', \alpha'') \tag{6.9}$$

l'amplitude de probabilité $c_{\alpha}(\alpha' | +\infty, \rho, v)$ est égale à l'élément de matrice S semi classique :

$$S_{\gamma\gamma'}(\tau = 0) = c_{\alpha}(\alpha' | +\infty, \rho, v) \tag{6.10}$$

où γ est l'équivalent semi classique de la représentation γ de la théorie quantique :

$$\gamma = \alpha \quad \rho \quad v$$
$$\gamma' = \alpha' \quad \rho \quad v$$

la résolution exacte du système (6.6), avec les conditions initiales (6.9), est impossible ; comme en théorie quantique, on obtient une solution approchée en tronquant la base des états atomiques, mais les calculs restent longs et délicats.

L'approximation de couplage faible, dont les conditions de validité ont été discutées au paragraphe précédent, revient à utiliser la théorie des perturbations dépendant du temps. On obtient ainsi une solution simple et rapide du problème.

6 - 2 Résolution approchée de l'équation de Schrödinger par la théorie des perturbations dépendant du temps.

Quand l'énergie électrostatique d'interaction peut être traitée comme une faible perturbation du hamiltonien atomique, les éléments de matrice de cette interaction $V_{\alpha\alpha''}(t)$ sont petits et le couplage entre les différents états atomiques est faible.

Au premier ordre de la théorie des perturbations dépendant du temps, le système est à l'instant t dans l'état initial :

$$c_{\alpha''}(\alpha' | t, \rho, v) = c_{\alpha''}(\alpha' | -\infty, \rho, v) = \delta(\alpha', \alpha'') = \delta(\gamma', \gamma'')$$

ce qui revient à négliger, dans le deuxième membre des équations (6.6), les amplitudes de probabilité d'excitation de l'état α' vers tout autre état $\alpha'' \neq \alpha'$, c'est-à-dire à négliger tout couplage entre les différentes voies du système.

On obtient ainsi les éléments de la matrice S au premier ordre,

$$S_{\gamma\gamma'}(\tau=0) = \delta(\gamma,\gamma') + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} V_{\alpha\alpha'}(t)\, e^{\frac{i}{\hbar}(E_\alpha - E_{\alpha'})t}\, dt \qquad (6.11)$$

et par suite la probabilité d'excitation de l'état initial α' vers l'état final α, différent de l'état α' :

$$P_{\alpha' \to \alpha}(+\infty, -\infty, \rho, v) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} V_{\alpha\alpha'}(t) e^{\frac{i}{\hbar}(E_\alpha - E_{\alpha'})}\, dt \right|^2 \qquad (6.12)$$

On peut montrer que cette approximation au premier ordre est rigoureusement équivalente à l'approximation de Born ou de Coulomb Born, pourvu que l'on puisse traiter classiquement la particule perturbatrice.

En ne gardant que le terme dipolaire du potentiel d'interaction électrostatique (6.3), et en faisant l'hypothèse que l'électron perturbateur reste toujours extérieur à l'atome, on obtient l'approximation équivalente à l'approximation de Bethe. Ceci constitue la méthode semi-classique du paramètre d'impact, développée par Seaton (1962) pour traiter les collisions entre électrons et atomes neutres, puis modifiée ensuite par Burgess (1963) pour tenir compte du caractère attractif de l'interaction quand l'atome est ionisé.

Pour introduire les effets de couplage avec les autres états du système, on doit développer les éléments de la matrice S au deuxième ordre de la théorie des perturbations dépendant du temps soit :

$$S_{\gamma\gamma'}(\tau=0) = \delta(\gamma,\gamma') + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} V_{\alpha\alpha'} \, e^{\frac{i}{\hbar}(E_\alpha - E_{\alpha'})t} \qquad (6.13)$$

$$+ \frac{1}{(i\hbar)^2} \sum_{\alpha''} \int_{-\infty}^{+\infty} V_{\alpha\alpha''} \, e^{\frac{i}{\hbar}(E_\alpha - E_{\alpha''})t} \, dt \int_{-\infty}^{t} V_{\alpha''\alpha'} \, e^{\frac{i}{\hbar}(E_{\alpha''} - E_{\alpha'})t'} \, dt'$$

6.3 Obtention des sections efficaces

Pour une valeur donnée de l'énergie cinétique de l'électron incident, la section efficace totale inélastique relative à la transition $\alpha' \to \alpha$ de l'atome est :

$$Q(\alpha' \to \alpha) = \int_0^{\infty} P_{\alpha' \to \alpha}(+\infty, -\infty, \rho, v) \, 2\pi\rho \, d\rho \qquad (6.14)$$

A cause de l'attraction coulombienne et des effets de couplage négligés qui deviennent importants pour les petites valeurs du paramètre d'impact , il est nécessaire d'introduire un paramètre de coupure minimum .Le choix de ce paramètre de coupure a été discuté par Seaton (1962).

Comme on ne tient généralement pas compte de l'orientation de l'atome dans l'espace, la probabilité d'excitation entre niveaux atomiques d'énergie

donnée s'obtient en sommant sur tous les sous-niveaux Zeeman finaux possibles et en moyennant sur tous les sous-niveaux Zeeman initiaux :

$$P_{\alpha' \to (+\infty, -\infty, \rho, v)} = \frac{1}{g_{\alpha'}} \sum_{M_\alpha M_{\alpha'}} | S_{\gamma\gamma'} |^2 \qquad (6.15)$$

L'intégrale (6.14) sur le paramètre d'impact correspond en mécanique quantique à la sommation sur les différentes valeurs du moment cinétique ℓ de l'électron incident.

Or, d'après (6.1), à une variation $d\ell = 1$ du nombre quantique orbital ℓ correspond une variation $d\rho$ du paramètre d'impact telle que :

$$2 \rho \, d\rho = \frac{(2\ell+1)}{k^2_{\alpha'}}$$

L'intégrale sur le paramètre d'impact est donc remplacée en mécanique quantique par une sommation sur les valeurs discrètes du moment cinétique ℓ :

$$Q(\alpha' \to \alpha) = \frac{\pi}{k^2_{\alpha'}} \frac{1}{g_{\alpha'}} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \sum_{M_\alpha M_{\alpha'}} | S_{\gamma\gamma'} |^2 \qquad (6.16)$$

On retrouve bien l'expression quantique (4.14) de la section de choc en représentation γ lorsqu'on néglige l'échange et qu'on ne tient pas compte du spin de l'électron incident :

$$Q(\alpha' \to \alpha) = \frac{\pi}{k^2_{\alpha'}} \frac{1}{(2L'+1)} \sum_{\substack{\ell\ell' \\ m_\ell m_{\ell'} \\ M_L M_{L'}}} | T_{\gamma\gamma'} |^2 \qquad (6.17)$$

En effet, aux grandes valeurs de ℓ le moment cinétique de l'électron est conservé :

$$\ell = \ell'$$

par conséquent $T_{\gamma\gamma'}$ est diagonal en ℓ et indépendant de m_ℓ d'où :

$$\sum_{\substack{\ell\ell' \\ m_\ell m_{\ell'}}} | T_{\gamma\gamma'} |^2 = \sum_{\ell} (2\ell+1) \, | T_{\gamma\gamma'} |^2$$

Après le calcul de l'intégrale(6.14), Seaton (1962) aboutit dans l'approximation dite du paramètre d'impact, à une expression très simple de la section de choc $Q(\alpha' \to \alpha)$ en fonction de la force d'oscillateur de la transition,de la différence d'énergie entre les deux niveaux atomiques de la transition, et de fonctions analytiques connues.

On dispose de programmes de calcul numérique qui donnent les sections efficaces des transitions dipolaires électriques extrêmement rapidement ; les temps nécessaires étant de l'ordre de quelques secondes.

6 - 4 - Conditions de validité. Comparaison avec les méthodes quantiques

a) Approximation du chemin classique

Pour pouvoir attribuer une trajectoire classique à l'électron incident, il faut que l'on puisse assimiler le perturbateur à un paquet d'ondes dont l'extension soit beaucoup plus petite que la distance à l'atome. Ceci revient à dire,que la longueur d'onde de De Broglie $\lambda\!\!\!^{-} = \frac{\hbar}{m_e v}$ doit être beaucoup plus petite que le paramètre d'impact ρ, soit :

$$\frac{m_e v \rho}{\hbar} \gg 1$$

ou $\sqrt{\ell\ (\ell+1)} \gg 1$ (6.18)

L'approximation semi classique n'est donc valable que si la contribution des petites valeurs de ℓ est négligeable. Elle sera donc particulièrement bien adaptée au calcul des sections efficaces des transitions dipolaires électriques où les grandes valeurs de ℓ interviennent de façon prépondérante.(cf. article 3, figure 1,pour ne citer que ce seul exemple).
Pour les transitions de structure fine dues au terme quadrupolaire du potentiel d'interaction, l'interaction est à courte portée, les collisions proches sont importantes, l'échange joue un rôle non négligeable et les calculs semi-classiques,trop sensibles au paramètre de coupure ne peuvent donner qu'un ordre de grandeur.

A titre d'exemple, on a établi dans le tableau suivant, une comparaison entre les sections efficaces des transitions de structure fine des termes $2s2p\,^3P$ et $2p^2\,^3P$ de l'ion OV calculées dans l'approximation semi-classique, et les sections correspondantes calculées dans l'approximation des ondes déformées pour une énergie totale de 3 Ryd.

TRANSITION DANS OV	E^T = 3 Ryd.	
	Ω_{SC}	Ω_{DW}
$2s2p\ ^3P_o$ - $2s2p\ ^3P_2$	0.30	0.14
$2s2p\ ^3P_1$ - $2s2p\ ^3P_2$	0.68	0.62
$2s2p\ ^3P_o$ - $2s2p\ ^3P_1$	0.16	0.26
$2p^2\,^3P_o$ - $2p^2\,^3P_2$	0.19	0.12
$2p^2\,^3P_1$ - $2p^2\,^3P_2$	0.42	0.60
$2p^2\,^3P_o$ - $2p^2\,^3P_1$	0.10	0.26

Les transitions d'échange pur telles que $2s^2\ ^1S_o$ - $2s\,2p\ ^3P_{o,2}$ de OV qui jouent un rôle important dans l'équilibre statistique (cf. article 3) ne peuvent pas être traitées dans l'approximation semi-classique. Il est nécessaire d'utiliser les méthodes quantiques.

b) Validité de la théorie des perturbations dépendant du temps

Une condition nécessaire de validité de la théorie des perturbations est :

$$P_{\alpha' \to \alpha}(+\infty, -\infty, \rho, v) \ll 1 \qquad (6.19)$$

De plus dans l'approximation dite du paramètre d'impact par Seaton (1962), où l'on ne conserve que le premier ordre du développement (6.13) et où l'on néglige tout couplage avec les autres états du système il faut que :

$$P_{\alpha'' \to \alpha}(+\infty, -\infty, \rho, v) \ll 1 \text{ pour tout } \alpha'' \neq \alpha \qquad (6.20)$$

Cette approximation de couplage faible sera valable pour les transitions dipolaires électriques dans les mêmes conditions que les approximations de couplage faible de la théorie quantique, c'est à dire aux grandes énergies.

$$\Delta E << k^2 \qquad (6.21)$$

Cependant dans cette approximation du paramètre d'impact, pour des énergies cinétiques de l'électron incident peu différentes de l'énergie d'excitation de la transition, on obtient, en utilisant des expressions symétrisées des probabilités de transition, suivant une procédure établie par Alder et al (1956), des résultats en bon accord avec ceux obtenus par des méthodes quantiques utilisant l'approximation de couplage faible. C'est ce que prouvent les résultats du tableau (6.1) pour les transitions dipolaires électriques des trois configurations $3s^2\ 3p^5$, $3s\ 3p^6$ et $3s^2\ 3p^4\ 3d$ de l'ion Fe X .
Les forces de collision ont été calculées dans l'approximation du paramètre d'impact(SC) et dans l'approximation des ondes déformées DWII (colonne 5 & 6), en utilisant la même structure atomique incluant les trois configurations précédemment citées (colonne 3). Nussbaumer (1974) a montré qu'on obtenait une amélioration de la structure atomique en incluant dix configurations données dans le tableau (6.1) (colonne 4). Avec une telle structure atomique le calcul quantique dans l'approximation des ondes déformées n'est pas envisageable, les mémoires des ordinateurs actuels n'étant pas suffisantes et le temps de calcul nécessaire rendant l'opération trop coûteuse. Par contre, l'approximation du paramètre d'impact permet de tenir compte de cette modification de structure atomique sans investissement coûteux (colonne 8)

Pour les transitions dipolaires du tableau (6.2), caractérisées par de faibles valeurs des forces de collision, on obtient un désaccord important entre les valeurs données par l'approximation du paramètre d'impact et l'approximation des ondes déformées DWII.Ceci indique que dans le développement(6.13)des éléments de la matrice S,on ne peut négliger les termes du second ordre devant les termes du premier ordre. Pour ces transitions, il faudrait tenir compte convenablement des effets de couplage, négligés dans l'approximation du paramètre d'impact et mal calculés dans l'approximation des ondes déformées DWII comme on l'a vu page 87. Cependant ces transitions étant faibles, leur influence sur les populations des niveaux de l'atome est négligeable,et une détermination précise des forces de collision correspondantes n'est pas nécessaire à la résolution des équations de l'équilibre statistique.

TRANSITION DIPOLAIRE DU Fe X i — j	ΔE_{ij} (2) 10cfs (Ryd)	f(i → j) (2) 3 cfs	 10 cfs	STRUCTURE ATOMIQUE 3 cfs $\Omega(i,j)E^T$ = 5.6 Ryd (1) S C	 DW II	$\frac{\Omega_{DW} - \Omega_{SC}}{\Omega_{DW}}$	STRUCTURE ATOMIQUE 10 cfs $\Omega(i,j)$ S C
$3s^2\ 3p^5\ {}^2P_{3/2}$ - $3s\ 3p^6\ {}^2S_{1/2}$	2.53	0.0295	0.035	0.44	0.60	0.27	0.53
${}^2P_{1/2}$ - ${}^2S_{1/2}$	2.39	0.0295	0.034	0.23	0.32	0.26	0.27
$3s^2\ 3p^5\ {}^2P_{3/2}$ - $3s^2\ 3p^4\ 3d\ {}^2S_{1/2}$	5.03	0.587	0.312	3.25	2.93	- 0.11	1.73
${}^2P_{1/2}$ - ${}^2S_{1/2}$	4.88	0.168	0.228	0.46	0.44	- 0.05	0.66
$3s^2\ 3p^5\ {}^2P_{3/2}$ - $3s^2\ 3p^4\ 3d'\ {}^2P_{3/2}$	5.41	0.857	0.767	4.59	4.15	- 0.10	4.11
${}^2P_{1/2}$ - ${}^2P_{1/2}$	5.26	0.092	0.026	0.26	0.24	- 0.05	0.07
$3s^2\ 3p^5\ {}^2P_{3/2}$ - $3s^2\ 3p^4\ 3d''\ {}^2D_{5/2}$	5.46	1.77	1.33	9.43	8.07	- 0.17	7.21
$3s^2\ 3p^5\ {}^2P_{3/2}$ - $3s^2\ 3p^4\ 3d'\ {}^2P_{1/2}$	5.46	0.027	0.104	0.15	0.13	- 0.07	0.56
${}^2P_{1/2}$ - ${}^2P_{1/2}$	5.32	0.885	0.565	2.46	2.17	- 0.13	1.59
$3s^2\ 3p^5\ {}^2P_{3/2}$ - $3s^2\ 3p^4\ 3d''\ {}^2D_{3/2}$	5.59	0.086	0.025	0.48	0.39	- 0.21	0.15
${}^2P_{1/2}$ - ${}^2D_{3/2}$	5.45	2.17	1.70	6.30	4.95	- 0.27	5.52

3 configurations (3cfs) $3s^2\ 3p^5$, $2s\ 3p^6$, $3s^2\ 3p^4\ 3d$

10 configurations (10cfs) $3s^2\ 3p^5$, $3s\ 3p^6$, $3s^2\ 3p^4\ 3d$, $3s\ 3p^5\ 3d$, $3s^2\ 3p^3\ 3d^2$, $3s^2\ 3p^4\ 4s$, $3p^6\ 3d$, $3s^2\ 3p^4\ 4d$, $3s\ 3p^4\ 3d^2$, $3p^6\ 4s$.

(1) tiré de H. Mason (1975)

(2) tiré de H. Nussbaumer (1974)

TRANSITION DIPOLAIRE DU Fe X i — j	ΔE_{ij} 10 cfs (Ryd) (2)	f(i → j) 3 cfs (2)	f(i → j) 10 cfs (2)	STRUCTURE ATOMIQUE 3 cfs Ω (i,j) E^T = 5.6 Ryd (1) S C	STRUCTURE ATOMIQUE 3 cfs Ω (i,j) E^T = 5.6 Ryd (1) DW II	$\frac{\Omega_{DW} - \Omega_{SC}}{\Omega_{DW}}$
$3s^2\ 3p^5\ {}^2P_{3/2}$ - $3s^2 3p^4 3d\ {}^2P_{1/2}$	3.67	$2.2 10^{-4}$	$1.5 10^{-4}$	2.10^{-3}	$2.6 10^{-2}$	0.92
${}^2P_{1/2}$ — ${}^2P_{1/2}$	3.76	$1.5 10^{-3}$	$1.5 10^{-3}$	$7.5 10^{-3}$	$1.5 10^{-2}$	0.50
$3s^2 3p^5\ {}^2P_{3/2}$ - $3s^2 3p^4 3d\ {}^2P_{3/2}$	3.94	$2.4 10^{-3}$	$2.4 10^{-3}$	$2.1 10^{-2}$	$5.8 10^{-2}$	0.63
${}^2P_{1/2}$ — ${}^2P_{3/2}$	3.81	$1.8 10^{-3}$	$1.5 10^{-3}$	$8.4 10^{-3}$	$3.2 10^{-2}$	0.73
$3s^2 3p^5\ {}^2P_{3/2}$ - $3s^2 3p^4 3d\ {}^2D_{3/2}$	4.00	$1.5 10^{-3}$	$4.0 10^{-4}$	$1.3 10^{-2}$	$7.0 10^{-2}$	0.81
${}^2P_{1/2}$ — ${}^2D_{3/2}$	3.85	$1.8 10^{-3}$	$1.8 10^{-3}$	$7.4 10^{-3}$	$1.6 10^{-2}$	0.56
$3s^2 3p^5\ {}^2P_{3/2}$ - $3s^2 3p^4 3d\ {}^2D_{5/2}$	4.09	$1.5 10^{-3}$	$2.3 10^{-3}$	$1.2 10^{-3}$	$5.6 10^{-2}$	0.76
$3s^2 3p^5\ {}^2P_{3/2}$ - $3s^2 3p^4 3d\ {}^2D_{3/2}$	4.78	$2.75 10^{-3}$	$1.14 10^{-3}$	$1.7 10^{-2}$	$3.4 10^{-2}$	0.50
${}^2P_{1/2}$ — ${}^2D_{3/2}$	4.64	$4.8 10^{-3}$	$6.5 10^{-3}$	$1.5 10^{-2}$	$2.4 10^{-2}$	0.34
$3s^2 3p^5\ {}^2P_{3/2}$ - $3s^2 3p^4 3d\ {}^2D_{5/2}$	4.83	$3.6 10^{-4}$	$3.2 10^{-6}$	$2.2 10^{-3}$	$2.2 10^{-2}$	0.91

(1) tiré de H. Mason (1975)

(2) tiré de H. Nussbaumer (1974)

En résumé, l'approximation du paramètre d'impact est une approximation de couplage faible valable pour les grandes valeurs du moment cinétique. Elle permet donc de calculer les forces de collision des transitions dipolaires fortes pour lesquelles on peut utiliser une structure atomique plus élaborée que celle que permettraient d'utiliser les méthodes quantiques. Cette approximation peut donner un ordre de grandeur des transitions quadrupolaires quand celles-ci ne sont pas des transitions d'échange pur.

De plus, comme on le verra au paragraphe suivant, cette approximation permet de calculer dans certains cas les effets moyens des résonances.

7 - Variation de la section efficace avec l'énergie

7.1. Comportement au dessus de tous les seuils.

Au dessus de tous les seuils d'excitation des niveaux inclus dans la structure atomique, la section efficace d'une transition est une fonction lentement variable de l'énergie. Ainsi aux grandes énergies, quand l'approximation de Coulomb Born est valable, le comportement de la section efficace avec l'énergie dépend du type de la transition considérée, et est donné dans le tableau suivant :

Transitions	Section efficace $Q(\alpha' \to \alpha)$
Dipolaire	$\sim \frac{1}{E} \log E$
Quadrupolaire	$\sim \frac{1}{E}$

7.2. Comportement au voisinage des seuils. Apparition des effets de résonance.

Pour des énergies inférieures à l'énergie du niveau le plus élevé considéré dans la structure atomique, la section efficace a une structure complexe dûe à des effets de résonance "Feshbach" qui se produisent au dessous du seuil de chaque niveau de l'ion.

a) Effet de la présence de niveaux d'autoionisation sur la section efficace.

Si on considère une énergie trop petite pour exciter le niveau α'' de l'atome, les voies Γ correspondantes à ce niveau sont fermées.

En fait, au dessous du seuil inélastique du niveau α'', l'électron incident de moment cinétique ℓ'' et l'atome $z = Z-N$ fois ionisé peuvent former un état ayant la même énergie qu'au niveau $\alpha^*(\alpha'', n\ell'')$ de l'atome $(z-1)$ fois ionisé. Un tel niveau α^* appartient à une série de Rydberg de l'atome $(z-1)$ fois ionisé contenant un électron d'une couche interne excité, et dont par conséquent la limite d'ionisation α'' se trouve au dessus de la limite d'ionisation la plus basse, qui est celle où un des électrons les plus extérieurs subit l'ionisation. Certains niveaux tels que α^* de cette série sont donc de même énergie que des états continus.
S'il y a interaction entre un tel niveau α^* discret et un niveau d'une configuration appartenant au spectre continu, ce niveau est un niveau quasi discret ou niveau d'autoionisation. Un tel niveau est métastable et a une largeur finie.

Cette propriété d'auto ionisation de certains niveaux du spectre discret de l'atome (z-1) fois ionisé apparaît comme une conséquence directe de l'interaction de configuration,étudiée dans T.A.S.p369. En effet, le hamiltonien de l'atome possèdant des éléments de matrice non nuls entre ce niveau discret très excité et un niveau de même énergie du spectre continu, la fonction d'onde de ce niveau quasi discret est une combinaison linéaire de fonctions d'onde d'une configuration discrète par construction, et d'une ou plusieurs configurations où un électron au moins est supposé libre. Commepour l'interaction entre configurations du spectre discret,il n'y a couplage entre un niveau discret et un niveau du continu, que s'ils ont la même parité et la même valeur du moment cinétique total J, de plus,dans le cas du couplage LS ils doivent avoir la même valeur de L et S. Si ces règles de sélection ne sont pas vérifiées le niveau discret garde son caractère original où les orbites des électrons sont fermées et n'atteignent jamais l'infini.

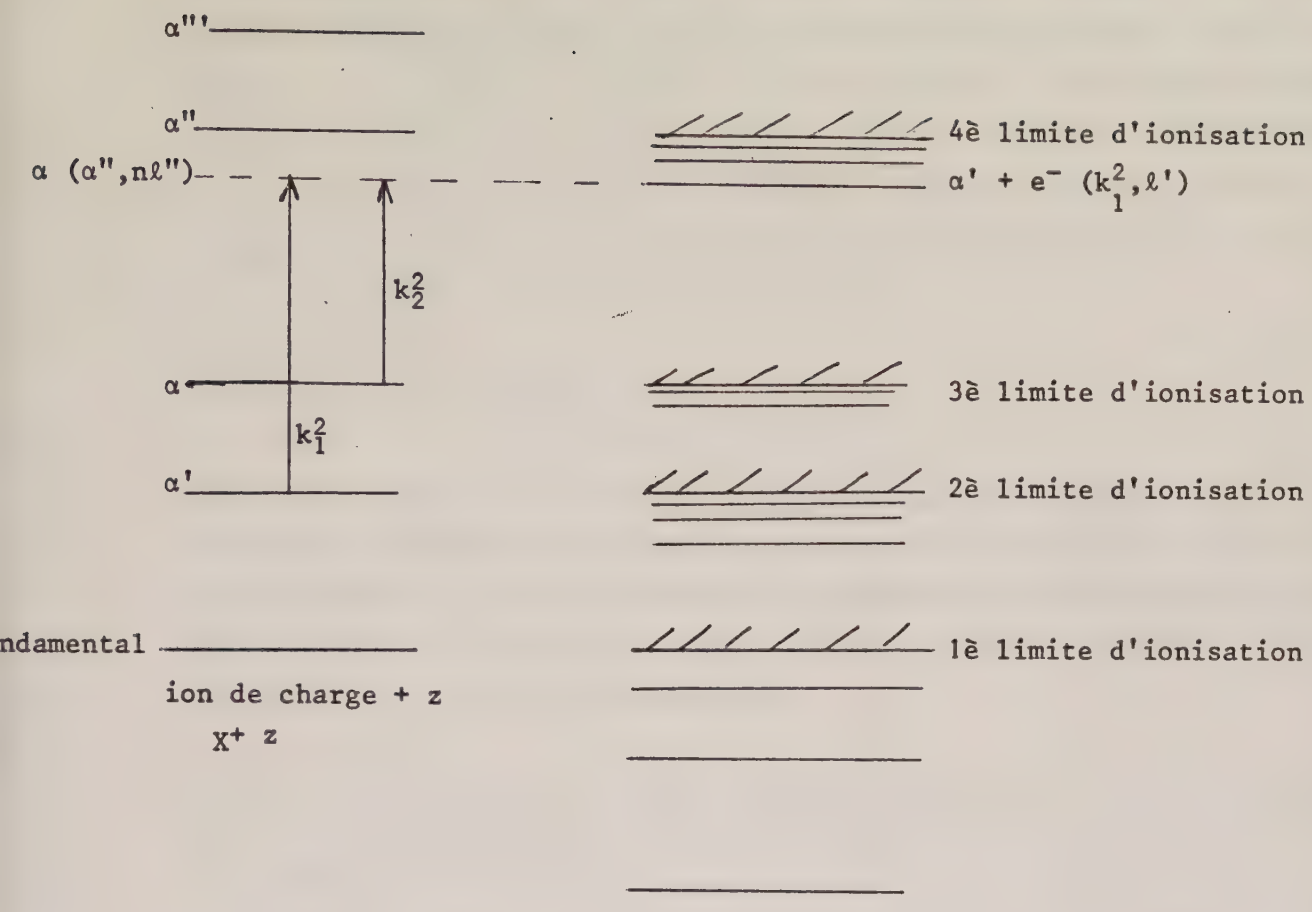
L'ion de charge (z-1) possède ainsi une ou plusieurs séries de niveau d'auto ionisation convergeant vers des limites d'ionisation qui sont les niveaux excités de l'ion correspondant de charge z. Il s'ensuit que, lorsque certaines voies sont fermées,les sections efficaces d'excitation des ions positifs contiennent des séries infinies de résonance convergeant vers les seuils d'ouverture de nouvelles voies.

Pour des énergies correspondant à ces états d'autoionisation , l'électron collisionnel reste près de l'ion plus longtemps avant d'être diffusé. La section efficace inélastique Q ($\alpha' \to \alpha$) est augmentée par l'excitation indirecte $\alpha' \to \alpha^* \to \alpha$ par l'intermédiaire du niveau α. Cette excitation, à une énergie bien déterminée, se déroule en deux étapes :

$$e(k_1^2,\ell') + X^{+z}(\alpha') \to X^{+(z-1)}(\alpha'',n\ell'') \qquad (1)$$

$$X^{+(z-1)}(\alpha'',n\ell'') \to e(k_2^2,\ell) + X^{+z}(\alpha) \qquad (2)$$

Dans l'étape (1) la collision entre l'électron incident d'énergie k_1^2 et de moment cinétique ℓ', et l'atome z fois ionisé dans l'état initial α' produit un atome (z-1) fois ionisé dans un état doublement excité $\alpha^*(\alpha'',n\ell'')$qui s'autoionise durant l'étape (2) pour redonner l'ion initial dans l'état excité α et un électron d'énergie k_2^2 et de moment cinétique ℓ. Ceci est illustré sur la figure de la page 103.



Fondamental

ion de charge + (z-1)

$X^{+(z-1)}$

Près du seuil, les niveaux d'autoionisation sont nombreux et l'effet moyen des résonances dues à la présence de ces niveaux se traduit par un accroissement brusque de la section $Q(\alpha' \rightarrow \alpha)$ au passage d'un nouveau seuil α''. Ceci est une conséquence du fait que pour les ions, la section efficace $Q(\alpha' \rightarrow \alpha'')$ est finie au seuil et que la somme des sections correspondant à toutes les transitions issues du niveau α' reste continue au passage d'un seuil. Comme pour les atomes neutres, la section efficace est nulle au seuil, de tels effets de résonance ne seront pas observés.

b) Calcul des résonances

On peut résoudre exactement le système d'équations couplées (1.18) pour des énergies cinétiques de l'électron incident pour lesquelles certaines voies sont fermées et d'autres ouvertes. Le programme numérique mis au point par Burke et al (1973) et le programme IMPACT de Seaton et Wilson (1972) rendent possible cette résolution numérique.

Quand on tient compte des voies fermées de nouveaux effets de couplage donnent naissance aux résonances dont l'origine physique a été expliquée précédemment. La théorie du défaut quantique, élaborée tout d'abord par Seaton (1958), dans le cas d'un système ne comprenant qu'une seule voie, puis généralisée au cas de plusieurs voies par Bely et al (1963) et Seaton (1966), permet d'inclure de façon analytique les effets des voies fermées sur les sections inélastiques pour les transitions entre voies ouvertes. La structure des résonances associées à un groupe de voies fermées, dégénérées ou non, a été ainsi analysée par Gailitis (1963) et par Seaton (1969). La théorie du défaut quantique consiste à prolonger analytiquement en fonction de l'énergie la matrice R en dessous des seuils d'excitation des différents niveaux de l'ion. Quand la voie Γ est fermée ($k_\Gamma^2 < 0$) on pose :

$$k_\Gamma^2 = - \frac{z^2}{\nu_\Gamma^2}$$

Ce qui définit le nombre quantique effectif ν_Γ de la voie Γ lié au défaut quantique μ_Γ par :

$$\nu_\Gamma = n - \mu_\Gamma$$

ou n est un entier.
Près du seuil les résonances sont très serrées, si bien que la quantité qu'il est intéressant de calculer est la valeur de la force de collision moyennée

sur les résonances. Chaque fois que ν_Γ varie d'une unité, la structure des résonances est repetée approximativement. Ceci entraîne que la valeur moyenne de la force de collision $< \Omega (\Gamma',\Gamma) >$ est donnée par :

$$< \Omega (\Gamma',\Gamma) > = \int_{\nu}^{\nu+1} \Omega (\Gamma, \Gamma') \, d\nu \qquad (7.1)$$

Cette intégrale peut être évaluée analytiquement. Gailitis (1963) et Seaton (1969 ont montré que dans les conditions pour lesquelles l'approximation de couplage faible est valable, la séparation des résonances dues aux séries de Rydberg convergeant vers la même limite est grande par rapport aux largeurs de ces résonances. Les termes d'interférence provenant du recouvrement des résonances appartenant à des séries distinctes peuvent alors être négligés,de même que ceux provenant du recouvrement des résonances convergeant vers différents niveaux de l'ion.

La valeur moyenne de la force de collision entre voies ouvertes juste en dessous du nouveau seuil α'' est alors donnée par une formule simplifiée :

$$< \Omega (\Gamma',\Gamma) > = \Omega^e(\Gamma',\Gamma) + \sum_{\Gamma''} \frac{\Omega^e(\Gamma',\Gamma'') \; \Omega \; (\Gamma'',\Gamma)}{\sum\limits_{\Gamma'''} \Omega^e(\Gamma'', \Gamma''')} \qquad (7.2)$$

où les quantités Ω^e sont calculées pour des énergies juste au dessus du nouveau seuil et extrapolées au dessous. Γ'' est sommée sur toutes les voies dégénérées du nouveau seuil et Γ''' est sommée sur toutes les voies qui restent ouvertes. Petrini (1970) obtient, pour la force de collision de la transition $^2P_{1/2} - {}^2P_{3/2}$ de la configuration fondamentale du Fe XIV, un accord de 20% entre la valeur de $<\Omega>$ calculée par la formule exacte (7.1) et la formule simplifiée (7.2) pour les différents seuils considérés.

Le deuxième terme de la formule (7.2) constitue la contribution résonante de la force de collision et est,pour les transitions interdites du même ordre de grandeur que le terme non résonant,comme le montre le calcul de $<\Omega>$ par la formule (7.2) pour la transition $2s^2 {}^1S - 2s\,2p\,{}^3P$ de l'ion OV (cf. article 3). Quand le niveau initial α' et le niveau final α de la transition sont fortement couplés aux voies fermées, par des potentiels dipolaires, l'effet moyen des résonances est très important. Ainsi la force de collision entre les niveaux de structure fine de l'état fondamental du Fe XIV est-elle multipliée par 10 au-dessous du seuil ^2D (Petrini(1970)).L'approximation semi classique-perturbations étant valable pour les transitions dipolaires électriques,on peut,

comme cela est démontré dans l'appendice 3, calculer la limite semi classique de la formule de Gailitis (7.2) :

$$\langle \Omega(\alpha',\alpha)\rangle = \Omega^{e}(\alpha',\alpha) + \sum_{\alpha''} \Omega^{e}(\alpha',\alpha'') \frac{A(\alpha'',\alpha)}{\sum_{\alpha'''} A(\alpha'',\alpha''')} \qquad (7.3)$$

α'' est sommé sur tous les niveaux dégénérés du nouveau seuil.
En utilisant cette formule très simple (7.3) écrite entre niveaux de l'ion, on retrouve à 10% près la valeur de la contribution résonante de la force de collision $\Omega\ (^2P_{1/2} - {}^2P_{3/2})$ du Fe XIV obtenue à partir de la formule (7.2) par Petrini (1970).

Cette expression (7.3) a été utilisée dans l'article 3 pour calculer les forces de collision entre les niveaux de structure fine de l'état métastable $2s2p^3P$ de l'ion OV. L'examen de la table V de l'article 3 montre que, l'effet le plus important dans le calcul de ces forces de collision, se produit au passage du seuil $2p^2\ {}^3P$ où, par exemple, la force de collision $\Omega({}^3P_1 - {}^3P_2)$ augmente brusquement d'une quantité égale à 2.5 fois sa valeur juste au-dessus du seuil $2p^2\ {}^3P$. Les valeurs des contributions résonantes $\Delta\Omega$ de ces forces de collision au passage de ce seuil calculées suivant la formule (7.2) sont données dans le tableau (7.1) pour chaque valeur de J^T. On retrouve les valeurs de $\Delta\Omega$ précédemment calculées par la formule (7.3) avec une précision d'environ 10%, sauf pour la transition $^3P_0 - {}^3P_2$ pour laquelle la formule (7.3) donne une valeur deux fois trop grande. Cette différence constatée entre le résultat donné par la formule de Gailitis et sa limite semi classique reste à expliquer.

Dans le calcul des sections de choc on doit toujours tenir compte de ces effets de résonance ; dans le cas des ions coronaux ils peuvent être évalués simplement par la formule de Gailitis (7.2) ou par sa limite semi classique (7.3). Cependant, dans certains cas, des interférences entre résonances, négligées dans ces formules, peuvent apparaître comme l'ont montré Hershkowitz et Seaton (1973) pour la transition $2s^2\ {}^1S - 2s2p^3P$ de l'ion OV en incluant les voies fermées dans la résolution du système d'équations couplées.

T A B L E A U 7.1

Calcul des effets moyens de résonance au passage du seuil $2p^2\ ^3P$ sur les forces de collisions entre niveaux de structure fine du terme $2s2p\ ^3P$ de l'ion OV.

J^T	$\Delta\Omega(^3P_0 - ^3P_1)$	$\Delta\Omega(^3P_0 - ^3P_2)$	$\Delta\Omega(^3P_1 - ^3P_2)$
0.5	0.030	0.019	0.023
1.5	0.008	0.032	0.105
2.5	0.030	0.024	0.126
3.5	0.072	0.075	0.253
4.5	0.097	0.058	0.334
5.5	0.068	0.037	0.310
6.5	0.041	0.021	0.200
7.5	0.023	0.011	0.114
8.5	0.012	0.005	0.061
9.5	0.006	0.003	0.032
10.5	0.003	0.001	0.016
$\sum_{J^T} \Delta\Omega^{J^T}$	0.390	0.286	1.574

B - COLLISION ION-PROTONS

Compte tenu de l'ordre de grandeur de la température de la couronne ($T_e \sim 7$ Ryd) et de la zone de transition (0.7 Ryd < T_e < 7 Ryd), et du rapport d'environ 50 entre les vitesses relatives des protons et des électrons collisionnels, les protons n'entreront en compétition avec les électrons que pour les transitions entre niveaux de structure fine d'une même configuration, la distance entre ces deux niveaux étant inférieure à 0.1 Ryd. A cause de la courte durée de vie des états excités, ces transitions n'interviendront guère que pour les transitions à l'intérieur de la configuration du fondamental et pour les niveaux métastables comme par exemple pour les transitions entre niveaux de structure fine du terme 2s 2p ^3P de OV.

1 - Equations couplées

1.1. Traitement quantique

Comme on a vu au début de ce chapitre, pour certains ions, il est nécessaire d'introduire l'interaction spin orbite de l'ion dans le hamiltonien du système ion-proton . Dans ce cas le spin total S^T et le moment angulaire total L^T ne sont pas conservés séparement comme dans le problème de collision électronique, par contre le moment cinétique total J^T est conservé. Une voie Γ du système est alors définie par :

$$\Gamma = aSLJ\ s\ell j\ J^T M_{JT}$$

Comme dans le cas électronique on doit résoudre un système d'équations différentielles couplées du second ordre sans échange. (le processus d'échange n'étant bien évidemment pas possible) :

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m_p} \frac{d^2}{dr_p^2} - \frac{\hbar^2}{2m_p} \frac{\ell_\Gamma(\ell_\Gamma + 1)}{r_p^2} - \frac{(Z - N)Z_p e^2}{r_p} + E \right] F_\Gamma(r_p) \qquad (1.1)$$

$$= -Z_p e \sum_{\Gamma''} V_{\Gamma\Gamma''} F_{\Gamma''}(r_p)$$

où r_p, m_p et E désignent respectivement la position, la masse et l'énergie cinétique du proton et $Z_p = +1$. Le système (1.1) a été résolu par Faucher (1974), celui-ci a appliqué le calcul quantique des sections efficaces aux transitions entre les niveaux $2p^2\ ^3P_{0,1,2}$ de la configuration de l'état fondamental du Fe XIII.

1.2. Traitement semi classique

A cause de l'effet de masse on peut prévoir (ce que prouve d'ailleurs a posteriori les résultats de Faucher) que les valeurs des moments angulaires ℓ du proton qui entrent en jeu seront grandes, environ 50 fois plus grandes que dans le cas des électrons. Faucher montre en effet, que les valeurs de $\ell < 50$ jouent un rôle négligeable dans le calcul des sections efficaces Comme de plus on s'intéresse à des transitions entre niveaux, dont les différences d'énergie sont au moins 50 fois plus petites que l'énergie cinétique desprotons, les conditions de validité de l'approximation semi classique sont remplies.

Au lieu du système quantique (1.1) on résout alors un système d'équations couplées semi classiques semblable à celui donné dans le paragraphe A-6 pour les collisions électroniques.

On obtient aussi les sections efficaces beaucoup plus simplement et plus rapidement que par le traitement quantique. Les équations couplées semi classiques ont été résolues indépendamment par Masnou Seeuws et Mac Carroll (1972) et par Landman (1975). Ce dernier a appliqué le calcul semi classique au cas du Fe XIII et retrouve les résultats quantiques de Faucher.

2 - Approximation de couplage faible

On a vu précédemment que, pour les ions coronaux, l'approximation de couplage faible est le plus souvent valable pour les collisions électroniques. Pour les collisions protoniques, cette approximation n'est pas valable dans les mêmes conditions.

Dans les équations couplées (1.1) l'énergie cinétique, l'énergie potentielle coulombienne et les énergies potentielles de couplage sont les mêmes que dans les équations couplées (A-1.18). Seules les valeurs de ℓ_p sont différentes, mais à cause de l'effet de masse, le potentiel centrifuge a le même ordre de grandeur pour les collisions électroniques et protoniques.

Par contre, alors que dans le cas des collisions électroniques l'énergie cinétique et l'énergie potentielle coulombienne sont additives, elles se retranchent dans le cas des collisions avec les protons. Il en résulte que, même si indépendamment ces deux termes sont grands devant les énergies potentielles de couplage, il devient exclu de faire l'approximation de couplage faible si ces deux termes sont

de même ordre de grandeur. Or la relation de conservation de l'énergie de la mécanique classique

$$E = \frac{(Z-N)Z_p e^2}{r_p} + \frac{1}{2} m v_p^2 \qquad (2.1)$$

montre que l'énergie potentielle coulombienne est au plus égale à l'énergie cinétique. La relation (2.1) donne en particulier la distance de plus courte approche r_c pour laquelle les énergies potentielles de couplage sont maximales :

$$r_c = \frac{(Z-N)\,Z_p}{\frac{E}{I_H}} a_0 \left[1 + \sqrt{1 + \frac{m_e}{m_p} \frac{\ell(\ell+1)}{(Z-N)^2 Z_p^2} \frac{E}{I_H}} \right] \qquad (2.2)$$

Comme 50 est un ordre de grandeur caractéristique pour le moment cinétique du proton à la distance de plus courte approche $\frac{m_e}{m_p}\ \ell(\ell+1) \simeq 1$, aux petites énergies E ou pour des charges (Z-N) élevées, la relation (2.2) devient :

$$r_c \simeq \frac{(Z-N)Z_p}{\frac{E}{I_H}} a_0 \left[2 + \frac{1}{2} \frac{E}{I_H} \frac{m_e}{m_p} \frac{\ell(\ell+1)}{(Z-N)^2 Z_p^2} \right] \qquad (2.3)$$

Pour les ions coronaux, le deuxième terme de la relation (2.3) peut être négligé si bien qu'aux petites énergies la distance de plus courte approche devient grande, comme la repulsion coulombienne le laisse d'ailleurs prévoir. Les énergies potentielles de couplage deviennent alors si petites qu'on peut même les négliger devant la différence entre l'énergie potentielle coulombienne et l'énergie cinétique. On s'attend à ce que l'approximation semi classique utilisant la théorie des perturbations dépendant du temps, devienne valable. C'est ce qu'on vérifie notamment en comparant les résultats obtenus en résolvant le système d' équations couplées de Masnou Seeuws et Mac Carroll (1972) pour la transition $P_{1/2} - P_{3/2}$ à l'intérieur de la configuration fondamentale du Fe XIV, aux résultats déduits de la théorie des perturbations par Seaton (1964)

Par contre aux énergies cinétiques plus élevées, les énergies potentielles de couplage ne sont plus négligeables et il faut résoudre le système d'équations couplées semi classique.

Aux très grandes énergies cinétiques c'est le deuxième terme du crochet (2.3) qui devient prépondérant et la distance de plus courte approche est donnée par :

$$r_c \simeq \frac{1}{2} \frac{\ell\,(\ell+1)}{(Z-N)\,Z_p} \frac{m_e}{m_p} a_0 \qquad (2.4)$$

la trajectoire hyperbolique du proton s'approche alors très près du noyau et des effets quantiques apparaissent. Le traitement semi classique n'est donc pas valable mais on peut, en revanche, utiliser l'approximation de Born (Faucher 1974).

L'approximation semi classique avec coupure, associée à la théorie des perturbations, (Seaton (1964), Bely et Faucher (1970), Sahal-Bréchot (1974)) permet de retrouver à un facteur 2 près, ou mieux (20%) selon les cas, les résultats des équations couplées semi-classiques à toutes les énergies intéressantes dans le domaine coronal. Son extrême simplicité d'utilisation incite donc à l'adopter pour les ions coronaux, d'autant plus qu'une faible précision est suffisante : en effet, à cause des effets de résonance dans les transitions de structure fine ion-électron, la contribution relative des collisions avec les protons ne dépasse guère 20%.

Cependant, si l'on désire une meilleure précision, il faut utiliser cette approximation avec précaution. Ainsi pour les transitions $2s2p\ ^3P_J - 2s2p\ ^3P_J$, de l'ion OV pour lequel Z - N = 4, les énergies cinétiques dans la zone de transition chromosphère-couronne variant de 2 à 6 Ryd environ ,l'approximation de couplage faible devient douteuse. C'est ce que semble montrer les résultats préliminaires de Faucher (1975); la théorie des perturbations ne donnerait pour cet ion des sections efficaces qu'à un facteur deux à toutes les énergies.

CONCLUSION

La détermination de la distribution des températures et des densités de l'atmosphère solaire constitue une étape nécessaire à la compréhension du problème fondamental que pose l'équilibre d'énergie entre la chromosphère, la zone de transition chromosphère-couronne et la couronne. Lorsqu'un ion possède soit un niveau métastable comme les ions de la série isoélectronique du bérylium, soit un état fondamental avec une structure fine comme l'ion Fe X, il est possible de déterminer la température et la densité électroniques (T_e,N_e) en faisant des rapports d'intensité de raies bien choisies de cet ion. Par cette méthode la connaissance des paramètres physiques (N_e,T_e) ne dépend que des paramètres atomiques ; aucun modèle de l'atmosphère solaire ne doit être construit et il n'est nécessaire de connaître ni les abondances relatives des éléments ni l'équilibre d'ionisation de chaque élément.

Le travail effectué sur l'ion OV a montré que les valeurs des paramètres physiques déduits des observations dépendaient de façon cruciale de la précision avec laquelle les données atomiques étaient obtenues. On a mis en évidence notamment que les effets de résonance sur les sections de choc des transitions entre niveaux de structure fine de l'état métastable 2s 2p ^{3}P, effets jusqu'alors ignorés, influençaient de façon très importante le résultat de l'équilibre statistique.

Bien que le spectre étudié soit sans résolution spatiale et que par conséquent, son analyse apporte peu d'informations sur la structure de l'atmosphère solaire, il constitue un moyen précieux qui permet de tester la validité des approximations faites dans le calcul des données atomiques. Alors que dans les plasmas de laboratoire, divers processus interviennent concurentiellement pour peupler les niveaux de l'atome, dans le plasma coronal l'intensité des raies observées s'interprète beaucoup plus simplement. Dans cette perspective, les raies ultraviolettes du spectre solaire présentent un intérêt tout particulier ; en effet, dans les conditions coronales, le rapport des intensités de deux de ces raies issues d'un même niveau est simplement proportionnel au rapport des probabilités d'émission spontanée.

De plus quand l'approximation de l'atome à deux niveaux est valable,le rapport des intensités de deux de ces raies s'exprime simplement en fonction des taux d'excitation par collision. Dans l'approximation semi-classique-perturbations les taux d'excitation par collision sont proportionnels aux forces d'oscillateur. On a donc ainsi un moyen direct de test de la structure atomique.

Ainsi, pour rendre compte des rapports d'intensité des raies observées sur ce spectre, Nussbaumer (1973) et (1974) a été conduit à introduire un plus grand nombre de configurations dans la structure atomique des ions Fe XIII et Fe X.

Par exemple, sur le spectre étudié, les intensités relatives des raies $3d\ ^2S_{1/2} - 3p^5\ ^2P_{3/2}$ / $3d'\ ^2P_{3/2} - 3p^5\ ^2P_{3/2}$ / $3d''\ ^2D_{5/2} - 3p^5\ ^2P_{3/2}$ du Fe X sont 1 : 2.6 :4.8
Les intensités relatives de ces raies calculées dans une structure atomique comportant trois configurations sont 1 : 1.45 : 3.0, l'inclusion de la configuration $3s\ 3p^4\ 3d^2$ a pour effet de modifier le rapport théorique qui devient 1 : 2.5 : 4.3 c'est à dire très voisin du rapport expérimental.

La conclusion de ce travail est, qu'alors que pour les ions fortement ionisés de la couronne des méthodes approchées peu coûteuses, telles que l'approximation des ondes déformées et l'approximation semi classique, permettent d'obtenir les sections efficaces de collision avec une précision suffisante, il est en revanche indispensable de calculer une structure atomique la plus élaborée possible. Il est donc impératif de disposer d'ordinateur ayant une capacité de mémoire suffisante pour mener à bien de tels calculs.
On peut espérer, à l'heure actuelle, obtenir les probabilités de transition avec une précision d'environ 10% dans les meilleurs cas. Quant à la précision sur les sections efficaces de collision, elle est pratiquement déterminée par la qualité des fonctions d'onde atomique.

Par la qualité des mesures des intensités des raies observées, le spectre étudié apparaît comme le résultat d'une expérience de physique atomique faite dans le laboratoire naturel que constitue l'univers.

REFERENCES

Alder K., Bohr A., Huns T, Mottelson B. & Winther A.	1956	Rev. Mod. Phys., 28, 432
Barrat J.P. & Cohen Tannoudji C.	1961	J. Phys. Rad., 22, 329
Bely F. & Vo Ky Lan	1968	CR. Acad.Sci.Paris, 267, 533
Bely O., Moores D. & Seaton M.J.	1963	Atomic Collision Processes Ed. MRC. Mc Dowell (Amsterdam : North Holland) 304
Bely O.	1964	Thèse Paris (Ed. C.N.R.S.)
Bely O., Tully J. & Van Regemorter H.	1963	Ann.Phys., 8, 303
Bely O. & Faucher P.	1970	Astron. & Astrophys., 6, 88
Bely-Dubau F.	1972	Thèse (Nice)
Berrington K.A.,Burke P.J., Chang J.J., Chivers A.T., Robb W.D. & Taylor K.T.	1973	J. Comp. Phys. Communication
Blaha M.	1969	Ap. J. 157, 473
Blume M. & Watson R.E.	1962	Proc.R. Soc. A, 270, 127
Burgess A.	1964	Culham Conf. At. Collisions, AERE Rep. 4818, 63
Burke P.G. & Seaton M.J.	1971	"Methods in computational Physics",10 1 (Acad. Press. Inc. New York)
Burke P.G., Tait J.H. & Lewis B.A.	1966	Proc.Phys.Soc., 87, 209
Burke P.G. & Mitchell J.B.M.	1974	J.Phys. B. 4, 314
Burke P.G., Hibbert A. & Robb W.D.	1972	J. Phys. B : (Atom.Molec.Phys.) 5, 37
Burton W.M. & Ridgeley A.	1970	Solar Physics, 14, 3
Condon E.U. & Shortley G.H.	1935	"The theory of Atomic Spectra" (T.A.S.) (London University Press Cambridge)
Dekker E.	1969	Astron. & Astrophys., 1, 72
De Shalit A. & Talmi I.	1963	Nuclear Shell Theory (Acad. Press., New York & London)
Eissner W.	1971	Physics of Electronic & Atomic Collisions VII ICPEAC (Amsterdam, North Holland) 460

Eissner W. & Nussbaumer H.	1969	J. Phys. B (Atom.Molec.Phys.)Ser.2,2,1028
Eissner W.,Nussbaumer H., Saraph H.E. & Seaton M.J.	1969	J. Phys.B (Atom.Molec.Phys.)Ser.2, 2, 341
Faucher P.	1974	Thèse (Nice)
Faucher P.	1975	VII Colloque national sur la Physique des collisions atomiques et électroniques Université de Bordeaux I - 5,7 Mai 1975
Fermi	1927	Rend. Lincei 6, 602
Fock V.	1930	Zeits für Phys. 61, 126
Froese - Fischer C.	1969	Computer Physics Communications 1 (North Holland Publishing CO.Amsterdam),151
Gailitis M.	1963	Sov.Phys.JETP, 17, 1328
Garstang R.H.	1967	Astrophys. J. 148, 579
Gombàs P.	1956	Handb.Phys.,36, 109 (Berlin : Springer-Verlag)
Hayes M.A.	1975	J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 8, L8
Hartree D.R.	1928	Proc. Camb.Phil.Soc., 24, 89
Hartree D.R.	1957	The calculation of the Atomic Structures (John Wiley & Sons, Inc.)
Henry R.J.W.	1974	J. Phys. B : Atom. Molec.Phys., 7, L 439
Hershkowitz M.D. & Seaton M.J.	1973	J. Phys. B : Atom. Molec.Phys., 6, 1176
Hibbert A.	1970	Computer Phys.Commun., 1, 359
Hibbert A.	1971	Computer Phys. Vommun.,2, 180
Hylleraas E.	1929	Zeits für Phys., 54, 347
Jones M.	1970	J. Phys. B : Atom.Molec.Phys., 3, 1571
Kelly R.L.	1963	Atomic Emission lines below 2000 Å Hydrogen through Argon (Washington : Government Printing Office)
Landman D.	1975	A paraître dans Astron. & Astrophys.
Layzer D.	1959	Ann. Phys., 8, 271
Le Dourneuf M.,Van Regemorter H. & Vo Ky Lan	1974	Papier invité à la conférence "Electron and Proton interactions with atoms" Stirling 16 19/07/1974 - sous presse.
Martinson I., Berry H.G., Bickel W.S. & Oona H.	1971	J. Opt.Soc.Am., 61, n° 4, 519

Masnou-Seeuws F. & Mc Carroll R.	1972	Astron. & Astrophys., 17, 441
Mason H.E.	1975	Communication privée
Mason H.E.	1975	Mon.Not.R. Str.Soc., 170, n° 3, 651
Messiah A.	1960	"Mécanique quantique" (Dunod Paris)
Moore C.E.	1952	"Atomic Energy Levels" circular 467, National Bureau of Standards Washington D.C
Nicolaïdes C.A. Beck D.R. & Sinanoglu O.	1973	J. Phys. B. 6, 62
Nussbaumer H.	1973	Astron. & Astrophys., 27, 303
Nussbaumer H.	1974	Communication personnelle
Petrini D.	1969	Astron. & Astrophys, 1, 139
Petrini D.	1970	Astron. & Astrophys.,9, 392
Pottasch S.R.	1964	Space Sci. Rev. 3, 816
Racah G.	1943	Phys. Rev., 63, 367
Sahal-Brechot S.	1974	Astron. & Astrophys., 32, 147
Saraph H.E.	1972	Comput. Phys.Commun., 3, 256 (North Holland publishing Company)
Schiff B. & Pekeris C.L.	1964	Phys. Rev. 134, A 638
Seaton M.J.	1958	Mon. Not.R. Astr.Soc, 118, 504
Seaton M.J.	1961	Proc. Phys. Soc., 77, 174
Seaton M.J.	1962	Proc. Phys. Soc., 79, 1105
Seaton M.J.	1964	M.N.R.A.S., 127, 191
Seaton M.J.	1966	Proc. Phys. Soc., 88, 801
Seaton M.J.	1969	J. Phys. B. Atom Molec Phys., 2, 5
Seaton M.J. & Wilson P.M.H.	1972	J. Phys. B. Atom. Molec. Phys., 5, L 1
Shore W.B. & Menzel D.H.	1968	Principle of Atomic Spectra (John Wiley & Sons, Inc. New York)
Sims J.S. & Whitten R.C.	1973	Physical Review A 8, n° 5, 2220
Slater J.C.	1960	"Quantum Theory of Atomic Structure" (Mac Graw Hill Book Co. Inc.)

Thomas	1927	Proc.Camb.Phil.Soc., 23, 542
Thomas	1926	Nature, 107, 514
Vo Ky Lan	1975	A publier dans Computer - Phys. Commun.
Weise W.L., Smith M.W. & Glennon B.M.	1966	"Atomic Transition Probabilities" National Standards Ref. Data Series NSRDS-NDS4.
Weiss A.W.	1973	Advances in Atomic & Molecular Physics 1, (Ed. par Bates D.R., Academic Press New York - London).

Règles de sélection pour les probabilités de transition radiatives (couplage LS)

Type de la transition		Dipôle		Quadrupôle	
		électrique $Q^{(1)}$	magnétique $M^{(1)}$	électrique $Q^{(2)}$	magnétique $M^{(2)}$
Configuration (1)	τ		$\Delta\tau = 0$		
	π	Changement de parité	Pas de changement de parité	Pas de changement de parité	Changement de parité
(2)	ℓ	1 saut d'électron $\Delta\ell = \pm 1$	pas de saut d'électron $\Delta\ell = 0$	1 saut ou pas de de saut d'électron $\Delta\ell = 0, \pm 2$	1 saut d'électron $\Delta\ell = \pm 1$
(3)	S	$\Delta S = 0$	$\Delta S = 0$	$\Delta S = 0$	$\Delta S = 0, \pm 1$
(4)	L	$\Delta L = 0, \pm 1$ $(0 \not\leftrightarrow 0)$	$\Delta L = 0$	$\Delta L = 0, \pm 1, \pm 2$ $(0 \not\leftrightarrow 0,\ 0 \not\leftrightarrow 1)$	-Si $\Delta S = 0, \Delta L = 0, \pm 1, \pm 2$ -Si $\Delta S = \pm 1, \Delta L = 0, \pm 1$ $(0 \not\leftrightarrow 0)$
(5)	J	$\Delta J = 0, \pm 1$ $(0 \not\leftrightarrow 0)$	$\Delta J = 0, \pm 1$ $(0 \not\rightarrow 0)$	$\Delta J = 0, \pm 1, \pm 2$ $(0 \not\leftrightarrow 0,\ 0 \not\leftrightarrow 1,\ \frac{1}{2} \not\leftrightarrow \frac{1}{2})$	$\Delta J = 0, \pm 1, \pm 2$ $(0 \not\leftrightarrow 0,\ 0 \not\leftrightarrow 1,\ \frac{1}{2} \not\leftrightarrow \frac{1}{2})$
(6)	M	$\Delta M = 0, \pm 1$	$\Delta M = 0, \pm 1$	$\Delta M = 0, \pm 1, \pm 2$	$\Delta M = 0, \pm 1, \pm 2$

L'interaction de configuration lève (2)

L'interaction spin-orbite lève (3) et (4).

APPENDICE 2

Forme, longueur, vitesse, accélération de l'opérateur dipolaire électrique.

L'équivalence entre les trois formes longueur, vitesse, accélération de l'opérateur dipolaire électrique, est établie pour un problème à une dimension.
oit un hamiltonien :

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m_e} + V$$

où V représente l'énergie potentielle de N électrons d'impulsion $\vec{p}_i = \vec{p}_{i,x}$

Le commutateur d'une fonction F(x) quelconque avec la composante x de l'opérateur impulsion $p_x = -i\,h\,\nabla_x$ est :

$$[F(x),\ p_x\ ] = ih\,\nabla_x F$$

Par conséquent, le commutateur du hamiltonien H et de l'opérateur dipolaire électrique $\sum_{j=1}^{N} ex_j$ est :

$$\left[\ H, \sum_{j=1}^{N} ex_j\ \right] = \left[\ \sum_{i=1}^{N} \frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m_e}\ ,\ \sum_{j=1}^{N} ex_j\ \right]$$

$$= \frac{e}{2m_e} \sum_{j=1}^{N} \left(p_j\ [p_j, x_j\ ] - [x_j, p_j\ ]\ p_j\right)$$

$$= -\frac{ihe}{m_e} \sum_{j=1}^{N} p_j$$

Dans une base de fonctions $\{\Psi_i\}$, l'élément de matrice de ce commutateur est :

$$\langle \Psi_f \mid \left[\ H, \sum_{j=1}^{N} ex_j\right]\ \mid \Psi_i \rangle = -\frac{ihe}{m_e} \langle \Psi_f \mid \left[\ \sum_{j=1}^{N} p_j\ \right] \mid \Psi_i \rangle$$

Si les fonctions Ψ_i et Ψ_f sont fonctions propres du hamiltonien H, on a :

$$\langle \Psi_f \mid H\ (\sum_{j=1}^{N} ex_j) - (\sum_{j=1}^{N} ex_j)\ H \mid \Psi_i \rangle = (E_f - E_i) \langle \Psi_f \mid \sum_{j=1}^{N} ex_j \mid \Psi_i \rangle$$

d'où

$$- \frac{\hbar^2 e}{m_e} < \Psi_f \mid \sum_{j=1}^{N} \nabla_j \mid \Psi_i > = (E_f - E_i) < \Psi_f \mid \sum_{j=1}^{N} ex_j \mid \Psi_i >$$

De même le commutateur du Hamiltonien H et de l'opérateur impulsion totale des N électrons est :

$$\left[H, \sum_{j=1}^{N} p_j \right] = \left[V, \sum_{j=1}^{N} p_j \right] = i\hbar \sum_{j=1}^{N} \nabla_j V$$

L'élément de matrice de ce commutateur dans la base $\{\Psi_i\}$ est :

$$< \Psi_f \mid \sum_{j=1}^{N} p_j \mid \mid \Psi_i > = i\hbar < \Psi_f \mid \sum_{j=1}^{N} \nabla_j V \mid \Psi_i >$$

Si Ψ_f et Ψ_i sont fonctions propres de H on en déduit :

$$- (E_f - E_i) < \Psi_f \mid \sum_{j=1}^{N} \nabla_j \mid \Psi_i > = < \Psi_f \mid \sum_{j=1}^{N} \nabla_j V \mid \Psi_i >$$

Par conséquent, si Ψ_i et Ψ_f sont fonctions propres du même hamiltonien H on a :

$$< \Psi_f \mid \sum_{j=1}^{N} ex_j \mid \Psi_i > = - \frac{\hbar^2 e}{m_e} \frac{< \Psi_f \mid \sum_j \nabla_j \mid \Psi_i >}{(E_f - E_i)} = \frac{\hbar^2 e}{m_e} \frac{< \Psi_f \mid \sum_{j=1}^{N} \nabla_j V \mid \Psi_i >}{(E_f - E_i)^2}$$

APPENDICE N° 3

LIMITE SEMI-CLASSIQUE DE LA FORMULE DE GAILITIS POUR LE CALCUL DE L'EFFET MOYEN DES RESONANCES DANS LE PROBLEME DE COLLISION ATOME - ELECTRON

Comme on s'intéresse dans cet appendice à la limite semi-classique, on néglige les variables de spin, puisque les effets d'échange n'interviennent que dans l'aspect quantique du problème de collision. Ceci présente l'avantage de simplifier considérablement l'écriture et n'enlève rien à la généralité du calcul qui suit.

Si on néglige l'échange, le spin total S de l'atome et le spin $s = \frac{1}{2}$ de l'électron incident sont conservés indépendamment ainsi que leurs projections. Le spin S de l'atome n'intervient que pour le calcul des sections entre niveaux $J = L+S$, $J' = L'+S$[1] à partir des éléments de la matrice T calculés en couplage LS pur et sans échange.

Dans la représentation couplée on définit une voie Γ par

$$(a\, L\, \ell\, L^T\, M^T\, E^T)$$

où $(a\, LM)$ caractérise l'atome et $(\vec{k}_a\, \ell\, m)$ l'électron incident. Le moment angulaire total L^T est conservé pendant la collision, la matrice S est diagonale en L^T et ses éléments sont indépendants de M^T. L'énergie totale $E^T = \frac{\hbar^2 k_a^2}{2m_e} + E_a$ est également conservée.

Dans la représentation découplée on définit une voie γ par

$$(k_a\, \ell m\ \ a\, L M)$$

---

(1) si le couplage LS est valable pour l'atome S est conservé. Sinon S n'est pas conservé et il faut utiliser les coefficients de couplage intermédiaire du chapitre I pour obtenir les sections entre niveaux, comme on l'a vu au chapitre III, § A5.

Dans l'approximation semi-classique, l'électron incident est traité comme une particule classique se mouvant sur une trajectoire caractérisée par un paramètre d'impact ρ et une vitesse initiale $v = k \frac{\hbar}{m_e}$. Le moment orbital de l'électron incident $\ell = k\rho$ est supposé conservé pendant la collision ainsi que ses projections par suite de la symétrie sphérique du problème. L'énergie cinétique $\frac{\hbar^2 k^2}{2 m_e}$ est également supposée conservée. Le moment orbital L de l'atome n'est pas conservé, ses projections M non plus, c'est une approximation valable aux grandes valeurs de ℓ et aux grandes énergies. La matrice S est par suite diagonale en ℓ et ses élements sont indépendants de m.

Pour calculer la limite semi-classique des expression quantiques donnant les sections efficaces, il convient donc d'utiliser la représentation découplée.

CALCUL DE LA LIMITE SEMI-CLASSIQUE DE LA FORMULE DE GAILITIS

La contribution de l'effet moyen des résonances à la section efficace Q (a L → a' L') est donnée par la formule de Gailitis en représentation couplée, où T = I - S est la matrice de transition :

$$\Delta Q(aL \to a'L') = \frac{\pi}{k_a^2} \frac{1}{2L+1} \sum_{\substack{\ell \ell' \\ L^T}} (2L^T+1)\,(\Delta T)^2, \qquad (A3.1)$$

avec

$$(\Delta T)^2 = \sum_{\substack{\ell_1 L_1 \\ \text{voies} \\ \text{fermées}}} \frac{\left| T(a\ell L L^T, a_1 \ell_1 L_1 L^T) \right|^2 \left| T(a_1 \ell_1 L_1 L^T, a'\ell' L' L^T) \right|^2}{\sum_{\substack{\ell_2 L_2 \\ \text{voies ouvertes}}} \left| T(a_1 \ell_1 L_1 L^T, a_2 \ell_2 L_2 L^T) \right|^2} .$$

Pour trouver la limite semi-classique de l'expression (A3.1), il faut passer en représentation découplée.

a) - découplons d'abord le dénominateur de (A3.1) après avoir multiplié par $(2L^T+1)$ le numérateur et le dénominateur.

Posons :

$$\mathcal{D} = \sum_{\ell_2 L_2} (2L^T+1) \left| T(a_1 \ell_1 L_1 L^T, a_2 \ell_2 L_2 L^T) \right|^2 .$$

T étant diagonal en L^T et ses élements étant indépendants de M^T, on peut écrire, en rajoutant un certain nombre de termes nuls et en utilisant les formules de changement de couplage

$$|\ell L L^T M^T\rangle = \sum_{mM} C^{\ell L L^T}_{m M M^T} \; |\ell m\rangle \, |L M\rangle \, ,$$

$$D = \sum_{\substack{\ell_2 L_2 \\ L_2^T M_2^T M^T \\ m_1 M_1 m_2 M_2 \\ m'_1 M'_1 m'_2 M'_2}} C^{\ell_1 L_1 L^T}_{m_1 M_1 M^T} \; C^{\ell_1 L_1 L^T}_{m'_1 M'_1 M^T} \; C^{\ell_2 L_2 L_2^T}_{m_2 M_2 M_2^T} \; C^{\ell_2 L_2 L_2^T}_{m'_2 M'_2 M_2^T} \times$$

$$\cdot T(k_{a_1} \ell_1 m_1 \; a_1 L_1 M_1, k_{a_2} \ell_2 m_2 \; a_2 L_2 M_2) \, T^*(k_{a_1} \ell_1 m'_1 \; a_1 L_1 M'_1, k_{a_2} \ell_2 m'_2 \; a_2 L_2 M'_2).$$

Les C sont les coefficients de Clebsch Gordan.

On peut faire la somme :

$$\sum_{L_2^T M_2^T} C^{\ell_2 L_2 L^T}_{m_2 M_2 M_2^T} \; C^{\ell_2 L_2 L^T}_{m'_2 M'_2 M_2^T} = \delta(m_2, m'_2) \, \delta(M_2, M'_2)$$

et il reste :

$$D = \sum_{\substack{\ell_2 m_2 \\ L_2 M_2 \\ m_1 m'_1 M_1 M'_1}} C^{\ell_1 L_1 L^T}_{m_1 M_1 M^T} \; C^{\ell_1 L_1 L^T}_{m'_1 M'_1 M^T} \; T(k_{a_1} \ell_1 m_1 \; a_1 L_1 M_1, k_{a_2} \ell_2 m_2 \; a_2 L_2 M_2) \times$$
$$\cdot T^*(k_{a_1} \ell_1 m'_1 \; a_1 L_1 M'_1, k_{a_2} a_2 \ell_2 m_2 \; L_2 M_2).$$

A la limite semi-classique, ℓ est grand, k, ℓ et m sont conservés. T est alors diagonal en (ℓ_1, ℓ_2) et ses éléments sont indépendants de m_1, m_2, m'_1, m'_2.

La sommation sur ℓ_2 est réduite au seul terme $\ell_2 = \ell_1$ et $m_2 = m'_1$, puisque les m sont conservés. La sommation sur m_2 revient à multiplier par $(2\ell_2 + 1)$ l'expression précédente, les éléments de T ne dépendant pas des m.

On obtient :

$$D = \sum_{\substack{L_2 M_2 \\ M_1 M'_1}} (2\ell_2 + 1) \; T(k \ell_1 ; a_1 L_1 M_1, a_2 L_2 M_2) \, T^*(k \ell_1 ; a_1 L_1 M'_1, a_2 L_2 M_2) \times$$
$$\cdot \sum_{\substack{m_1 \\ M^T}} C^{\ell_1 L_1 L^T}_{m_1 M_1 M^T} \; C^{\ell_1 L_1 L^T}_{m_1 M'_1 M^T} \, .$$

La sommation ci-dessus sur m_1, M^T est égale à $\delta(M_1, M'_1)$.

On peut alors effectuer la sommation sur M_1 et M_2, ce qui fait apparaître la probabilité de transition P entre les termes $a_1 L_1$ et $a_2 L_2$ pour le paramètre d'impact ρ et l'impulsion k :

$$\mathcal{D} = (2\ell_2+1)(2L_1+1) \sum_{L_2} P\left(k, \rho = \frac{\ell_2}{k} ; a_1 L_1 \to a_2 L_2\right) \qquad (A3.2)$$

$$= (2\ell_1+1) \quad " \quad " \quad " \quad " \quad " \quad " \quad " \quad " \quad .$$

Remarquons que le dénominateur est devenu indépendant de L^T

b) - découplons maintenant le numérateur

On peut d'abord écrire, en utilisant (A3.1) et le résultat ci-dessus :

$$\Delta Q(aL \to a'L') = \frac{\pi}{k_a^2} \frac{1}{(2L+1)} \sum_{\substack{\ell\ell' \\ L^T}} (2L^T+1)^2 \sum_{\ell_1 L_1} \frac{\left|T(a\ell L L^T, a_1 \ell_1 L_1 L^T)\right|^2 \left|T(a_1 \ell_1 L_1 L^T, a'\ell' L' L^T)\right|^2}{(2\ell_1+1)(2L_1+1) \sum_{L_2} P(k, \rho ; a_1 L_1 \to a_2 L_2)} .$$

On va découpler, en inversant la somme sur ℓ_1 L_1 de celles sur $\ell\ell'$ L^T dans le numérateur de l'expression ci-dessus :

$$N = \sum_{\substack{\ell\ell' \\ L^T}} (2L^T+1)^2 \left|T(a\ell L L^T, a_1 \ell_1 L_1 L^T)\right|^2 \left|T(a_1 \ell_1 L_1 L^T, a'\ell' L' L^T)\right|^2 .$$

Posons :

$$N_1 = \sum_{\ell} (2L^T+1) \left|T(a\ell L L^T, a_1 \ell_1 L_1 L^T)\right|^2 \quad ;$$

en rajoutant un certain nombre de termes nuls comme dans a), on trouve :

$$N_1 = \sum_{\substack{\ell \\ L_1^T M_1^T \\ M^T}} \left|T(a\ell L L^T M^T, a_1 \ell_1 L_1 L_1^T M_1^T)\right|^2 .$$

En découplant, il vient :

$$N_1 = \sum_{\substack{L_1^T M_1^T M^T \\ m_1 M_1 \; m_1' M_1' \\ m M \; m' M'}} C^{\ell L L^T}_{m M M^T} \; C^{\ell L L^T}_{m' M' M^T} \; C^{\ell_1 L_1 L_1^T}_{m_1 M_1 M_1^T} \; C^{\ell_1 L_1 L_1^T}_{m_1' M_1' M_1^T} \; \times$$

$$\cdot T(k\, \ell m \; a L M \,, k_{a_1} \ell_1 m_1 a_1 L_1 M_1)\, T^*(k_a \ell m' a L M' \,, k_{a_1} \ell_1 m_1' a_1 L_1 M_1')$$

On peut faire la somme :

$$\sum_{L_1^T M_1^T} C^{\ell_1 L_1 L_1^T}_{m_1 M_1 M_1^T} \; C^{\ell_1 L_1 L_1^T}_{m_1' M_1' M_1^T} = \delta(m_1, m_1')\, \delta(M_1, M_1')$$

et il reste :

$$N_1 = \sum_{\substack{m_1 M_1 \; m M \\ m' M' M^T \ell}} C^{\ell L L^T}_{m M M^T} \; C^{\ell L L^T}_{m' M' M^T} \; T(k_a \ell m \; a L M, k_{a_1} \ell_1 m_1 a_1 L_1 M_1) \times$$

$$\cdot T^*(k_a \ell m' a L M', k_{a_1} \ell_1 m_1' a_1 L_1 M_1')$$

On procède comme en a) pour obtenir la limite semi-classique :

T étant diagonal en ℓ et ses éléments étant indépendants de m, la sommation sur ℓ est réduite au seul terme $\ell = \ell_1$ et $m = m', m_1 = m'_1$; la sommation sur m_1 revient à multiplier l'expression par $(2\ell_1 + 1)$:

$$N_1 = \sum_{\substack{M_1 \\ M M'}} (2\ell_1+1)\, T(k \ell_1 ; a L M, a_1 L_1 M_1)\, T^*(k \ell_1 ; a L M', a_1 L_1 M_1) \times$$

On obtient :

$$\cdot \underbrace{\sum_{m M^T} C^{\ell L L^T}_{m M M^T} \; C^{\ell L L^T}_{m M' M^T}}_{\delta(M, M')} \cdot$$

$$N_1 = (2\ell_1+1)(2L+1)\, P\left(k, \rho = \frac{\ell_1}{k} ; a L \to a_1 L_1\right) \qquad (A3.3)$$

Transformons le numérateur N en utilisant (A.3.3), il vient :

$$N = \sum_{\substack{\ell' \\ L^T}} (2L^T+1) \left| T(a_1 \ell_1 L_1 L^T, a' \ell' L' L^T) \right|^2 (2\ell_1+1)(2L+1) \times$$

$$\cdot P\left(k, \rho = \frac{\ell_1}{k} ; a L \to a_1 L_1\right).$$

d'où :

$$\Delta Q(aL \to a'L') = \frac{\pi}{k_a^2} \frac{1}{(2L+1)} \sum_{\ell_1 L_1} \frac{(2\ell_1+1)(2L+1) P(k, \rho=\frac{\ell_1}{k}, aL \to a_1 L_1) \sum_{\ell' L'^T} (2L'^T+1) \left| T(a_1 \ell_1 L_1 L'^T, a' \ell' L' L'^T) \right|^2}{(2\ell_1+1)(2L_1+1) \sum_{L_2} P(k, \rho=\frac{\ell_1}{k}; a_1 L_1 \to a_2 L_2)}$$

$$= \frac{\pi}{k_a^2} \sum_{\ell_1 L_1} \frac{P(k, \rho=\frac{\ell_1}{k}; aL \to a_1 L_1) \sum_{\ell' L'^T} (2L'^T+1) \left| T(a_1 \ell_1 L_1 L'^T, a' \ell' L' L'^T) \right|^2}{(2L_1+1) \sum_{L_2} P(k, \rho=\frac{\ell_1}{k}; a_1 L_1 \to a_2 L_2)}$$

Il reste à arranger :

$$N_2 = \sum_{\ell' L'^T} (2L'^T+1) \left| T(a_1 \ell_1 L_1 L'^T, a' \ell' L' L'^T) \right|^2 = \sum_{\substack{\ell' L'^T L'^T \\ M^T M'^T}} \left| T(a_1 \ell_1 L_1 L'^T M'^T, a' \ell' L' L'^T M'^T) \right|^2$$

en rajoutant un certain nombre de termes nuls comme précédemment.

On découple :

$$N_2 = \sum_{\substack{\ell' L'^T L'^T M^T M'^T \\ m_1 M_1 \; m' M' \\ m'_1 M'_1 \; m'' M''}} C^{\ell_1 L_1 L'^T}_{m_1 M_1 M^T} \; C^{\ell_1 L_1 L'^T}_{m'_1 M'_1 M^T} \; C^{\ell' L' L'^T}_{m' M' M'^T} \; C^{\ell' L' L'^T}_{m'' M'' M'^T} \times$$

$$\cdot T(k_{a_1} \ell_1 m_1 a_1 L_1 M_1, k_{a'} \ell' m' a' L' M') \, T^*(k_{a_1} \ell_1 m'_1 a_1 L_1 M'_1, k_{a'} \ell' m'' a' L' M'').$$

on peut faire les sommes :

$$\sum_{L'^T M^T} C^{\ell_1 L_1 L'^T}_{m_1 M_1 M^T} \; C^{\ell_1 L_1 L'^T}_{m'_1 M'_1 M^T} = \delta(m_1, m'_1) \; \delta(M_1, M'_1),$$

$$\sum_{L'^T M'^T} C^{\ell' L' L'^T}_{m' M' M'^T} \; C^{\ell' L' L'^T}_{m'' M'' M'^T} = \delta(m', m'') \; \delta(M', M''),$$

et il reste :

$$N_2 = \sum_{\substack{\ell' m' M' \\ m_1 M_1}} \left| T(k_{a_1} \ell_1 m_1 a_1 L_1 M_1, k_{a'} \ell' m' a' L' M') \right|^2 .$$

On prend alors la limite semi-classique : la sommation sur ℓ' est réduite au seul terme $\ell' = \ell_1$; m étant conservé, la sommation sur m revient à multiplier par $2\ell_1+1$ l'expression ci-dessus.

On obtient :

$$N_2 = \sum_{M_1 M'} (2\ell_1+1) \left| T\left(k, \rho = \frac{\ell_1}{k} ; a_1 L_1 M_1, a' L' M'\right)\right|^2$$

$$= (2\ell_1+1)\ (2L_1+1)\ P\left(k, \rho = \frac{\ell_1}{k} ; a_1 L_1 \to a' L'\right)$$

On porte dans l'expression de $\Delta Q\ (aL \to a'\ L')$; on obtient :

$$\Delta Q(aL \to a'L') = \frac{\pi}{k^2} \sum_{\ell_1 L_1} \frac{P\left(k, \rho=\frac{\ell_1}{k}; aL \to a_1 L_1\right)(2\ell_1+1)(2L_1+1) P\left(k, \rho=\frac{\ell_1}{k}; a_1 L_1 \to a'L'\right)}{(2L_1+1) \sum_{L_2} P\left(k, \rho=\frac{\ell_1}{k}; a_1 L_1 \to a_2 L_2\right)}$$

$$= \frac{\pi}{k^2} \sum_{\ell_1} (2\ell_1+1) \sum_{L_1} \frac{P(k,\rho; aL \to a_1 L_1)\ P(k,\rho; a_1 L_1 \to a'L')}{\sum_{L_2} P(k,\rho; a_1 L_1 \to a_2 L_2)} .$$

Il reste à identifier $\frac{\pi}{k^2} \sum_{\ell_1} (2\ell_1+1)$ à $\int 2\pi\rho\, d\rho$ pour avoir l'expression semi-classique de ΔQ :

$$\Delta Q_{sc}\ (aL \to a'L') = \int 2\pi\rho\ d\rho\ \ \Delta P_{sc}(k,\rho; aL \to a'L'),$$

avec

$$\Delta P_{sc}(k,\rho; aL \to a'L') = \sum_{L_1} \frac{P(k,\rho; aL \to a_1 L_1)\ P(k,\rho; a_1 L_1 \to a'L')}{\sum_{L_2} P(k,\rho; a_1 L_1 \to a_2 L_2)} .$$

Entre niveaux aSL J, a'SL' J', on aurait obtenu en effectuant un calcul similaire, mais un peu plus compliqué puisqu'on aurait du rajouter les variables de spin de l'atome et de l'électron incident :

$$\Delta Q_{sc}(aSLJ \to a'SL'J') = \int 2\pi\rho\, d\rho\ \ \Delta P\ (k, \rho; aSLJ \to a'SL'J'),$$

avec

$$\Delta P_{sc}(k,\rho; aSLJ \to a'SL'J') = \sum_{L_1 J_1} \frac{P(k,\rho; aSLJ \to a_1 S L_1 J_1)\ P(k,\rho; a_1 S L_1 J_1 \to a'SL'J')}{\sum_{L_2 J_2} P\left(k,\rho; a_1 S L_1 J_1 \to a_2 S L_2 J_2\right)} .$$

Il reste à intégrer sur le paramètre d'impact.

On peut remarquer que si la théorie des perturbations est valable :

$$\frac{P(k,\rho;a_1 S L_1 J_1 \to a' S L' J')}{\sum_{L_2 J_2} P(k,\rho;a_1 S L_1 J_1 \to a_2 S L_2 J_2)} \simeq \frac{A(a_1 S L_1 J_1 \to a' S L' J')}{\sum_{\cancel{L_2} J_2} A(a_1 S L_1 J_1 \to a_2 S L_2 J_2)}$$

car en pratique, la contribution principale à l'effet moyen des résonances provient des différents niveaux de mêmes termes $a_1\ SL_1$, $a_2\ SL_2$, si bien que les différences d'énergies des niveaux a, L, SJ_1, $a_2\ S_2\ L_2\ J_2$ sont voisines, ce qui permet d'écrire, en utilisant

$$Q_{SC}(a S L J \to a_1 S L_1 J_1) = \int 2\pi\rho\, d\rho\ P(k,\rho;a S L J \to a_1 S L_1 J_1),$$

$$\Delta Q_{SC}(a S L J \to a' S L' J') = \sum_{\cancel{J_1}} Q(a S L J \to a_1 S L_1 J_1) \frac{A(a_1 S L_1 J_1 \to a' S L' J')}{\sum_{J_2} A(a_1 S L_1 J_1 \to a_2 S L_2 J_2)}$$

ARTICLE 1

Ceci est un tiré à part d'un article paru dans Solar Physics (1972) 23, 369. Le spectromètre U.V. ayant fourni le spectre solaire étudié dans cette thèse ainsi que les méthodes de calibration de l'appareil y sont décrites.

Des rapports d'intensité de raies ultraviolettes des ions O VI, Ne VIII et Mg X on déduit les températures électroniques des régions émissives que l'on compare aux températures correspondant au maximum des courbes d'ionisation de ces ions.

This is an offprint of an article which has been published originally in

SOLAR PHYSICS

A Journal for Solar Research and the Study of Solar Terrestrial Physics

Editors: C. de Jager and Z. Švestka

Six volumes are published annually

Subscription price per volume	Dfl. 120,00 (US $ 39.–)
Plus postage and handling charges	Dfl. 10,– (US $ 3.25)
Total subscription price per volume	Dfl. 130,– (US $ 42.25)

Personal subscription price on request

Complete back volumes available

Orders may be placed with your agent or directly with the publisher

Subscription order form

☐ Please enter my subscription to SOLAR PHYSICS at the total subscription price of Dfl. 130,– (US $ 42.25) per volume, as of Volume ....., until cancellation

☐ Check enclosed

☐ Please bill me

Name: _____ Date: _____

Address: _____

City: _____ Country: _____

Area Code: _____ Data: _____ Signature:

D. REIDEL PUBLISHING COMPANY

P.O. BOX 17, DORDRECHT-HOLLAND

The design of the experiment was strongly influenced by previous work (Heroux, 1964; Schwob, 1964) that described a method of obtaining the electron temperature of a high-temperature low-density plasma from the intensity ratio of EUV spectral lines from a given lithiumlike ion. The application of this method to measure electron temperatures requires that the flux density ϕ in photons cm^{-3} s^{-1} of the different spectral lines from the same lithiumlike ion have the same relative spatial distribution within the plasma. If the emission of the spectral lines is determined simply by direct collisional excitation from the ground level followed by radiative decay, the ratio of the spectral line intensities for the ion will be independent of the electron and ion density and be given simply by the ratio of the excitation rate coefficients X (cm^3 s^{-1}) of the lines which depend on T_e only. These density-independent ratios $R(T_e)$ can therefore be calculated for a Maxwellian velocity distribution for the electrons. Thus a measurement of an intensity ratio together with the calculated ratio $R(T_e)$ gives a unique determination of the temperature of the plasma.

This simple method of measuring electron temperatures can be applied to certain lithiumlike ions present in the Sun. For the method to be applicable, the different spectral lines of the lithiumlike ion must be emitted predominantly in nearly the same temperature region in the solar atmosphere. The experimental temperature then gives the average temperature for the region in which the spectral lines comprising the ratio are predominant. This temperature can then be compared to the temperature region of maximum emission of the spectral lines predicted by various theoretical values of $n(i)/n(E)$ vs T_e, thus providing a useful test of the ionization equilibrium calculations. The application of this method to measure the spectral line emission temperatures of the ions O VI, Ne VIII, and Mg X is discussed briefly.

In planning this experiment, the four ions N V, O VI, Ne VIII and Mg X were selected for analysis. To measure the intensity ratios during the limited time available in a rocket experiment, with sufficient accuracy to obtain meaningful comparisons with the theoretical ratios, a new spectrometer was developed. This spectrometer and its photometric calibration over the wavelength range 45 to 1236 Å will also be described in this paper. From the data obtained in the rocket flight, three ratios could be determined for each of the ions O VI and Mg X and one ratio for the ion Ne VIII. Intensity ratios could not be obtained for the N V ion because the multiplets from the $n=3$ level were all too weak and were also blended with neighboring solar emission lines.

2. The Calculations of Absolute Intensities and Intensity Ratios

Figure 1 illustrates the relative energy spacing of the terms of a typical lithiumlike ion and the multiplets which are analyzed in the present investigation. When the excited level p of the ion is populated only by electron excitation from the ground term g ($2s$ level in Figure 1) and depopulated by radiative decays, the photon emission rate $\phi(l, p)$ in photons cm^{-3} s^{-1} for the transition between level p and a lower level l is given by

$$\phi(l, p) = n_e n_g X(g, p) A_{pl}/A_p . \tag{1}$$

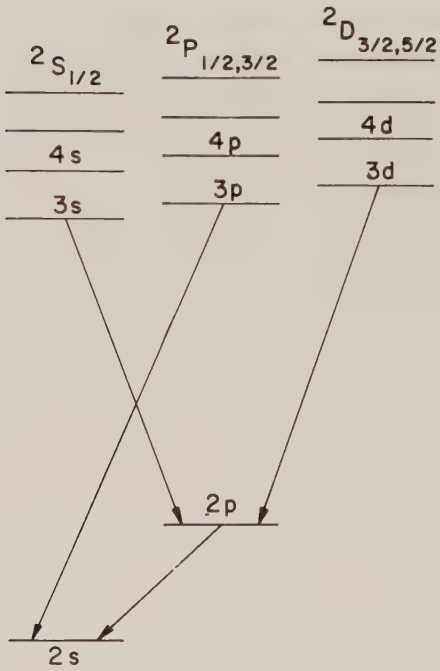


Fig. 1. Typical term diagram for the lithiumlike ion.

Here n_e is the electron density (cm^{-3}), n_g the population density of the ground term of the ion, and $X(g, p)$ the excitation rate coefficient ($cm^3\ s^{-1}$) which depends on electron temperature T_e. In equation (1), A_{pl} is the probability for the radiative transition $p \rightarrow l$ and A_p the total probability of all transitions out of level p. For the particular multiplets shown in Figure 1, the ratio A_{pl}/A_p is either unity or very close to unity. Equation (1) should be valid in general for the higher stages of the lithiumlike ions which have no metastable states and are produced in the upper chromosphere and corona where the electron density is low and the spectral lines are optically thin. An additional assumption justifying Equation (1) is that cascading transitions do not contribute significantly to the populations of the excited levels. A partial experimental check of this assumption for the $2p$ level of the ions O VI and Mg X can be made in the present experiment, since the rate of the two important cascading transitions $2p-3d$ and $2p-3s$ can be measured. These transitions contribute about 1% to the population of the $2p$ level in O VI and Mg X (Table II, Section 4).

Equation (1) can be modified for the solar atmosphere (Pottasch, 1964) and, for the multiplets considered here ($A_{pl}/A_p = 1$), it becomes

$$\phi(l, p) = 0.8\,(n(E)/n(H))\,(n(i)/n(E))\,X(g, p)\,n_e^2\,, \tag{2}$$

where the number densities of the element $n(E)$ and of hydrogen $n(H)$ have been introduced as well as the relation $n(H) = 0.8\,n_e$. For the conditions of excitation assumed here, the steady-state population densities of the excited levels of the ion relative

to the ground level, given by $n_p/n_g = n_e X(g, p)/A_p$, will be negligible. Hence the ions will be predominantly in their ground term and n_g has been set equal to $n(i)$, the total number density of the ion species.

The intensity $I(l, p)$ of the spectral line in photon s^{-1} emitted by the Sun is obtained by integrating Equation (2) over the emitting region of the plasma. The spectral line intensity in photons $cm^{-2}\ s^{-1}$ emitted by the whole Sun and measured at the Earth is given by

$$I(l, p) = 0.8\,(R_0^2/2D^2)\,(n(E)/n(H)) \int (n(i)/n(E))\, X(g, p)\, n_e^2\, dh\,. \qquad (3)$$

In this equation, R_0 is the solar radius, D is the distance between the Earth and Sun' and the factor $\frac{1}{2}$ assumes that the half of the radiation directed outward from the Sun escapes the solar atmosphere. It has also been assumed that the abundance of the element does not change with position in the solar atmosphere; the ratio $n(E)/n(H)$ has therefore been taken outside the integral. As pointed out by Pottasch (1964), dh in Equation (3) is a substitution for the emitting volume element dV in the solar atmosphere from the relation $dh = dV/4\pi R_0^2$ but does not imply that the emitting region is necessarily symmetric or homogeneous. Equation (3) can be rewritten to give the intensity of the spectral line in terms of the electron temperature in the solar atmosphere as

$$I(l, p) = 0.8\,(R_0^2/2D^2)\,(n(E)/n(H)) \times$$
$$\times \int (n(i)/n(E))\, X(g, p)\, n_e^2\, (dh/d \log T_e)\, d \log T_e\,, \qquad (4)$$

where T_e is the temperature corresponding to the emitting volume. This equation will be used to evaluate the spectral line intensities and the intensity ratios of the lithiumlike ions. The constant factors in Equation (4) cancel in the calculation of the intensity ratios of spectral lines from the same ion species.

The excitation rate coefficient $X(g, p)$ in Equation (4) for the general transition $g \rightarrow p$ is defined as

$$X(g, p) = \int_0^\infty Q(g, p)\, v f(v)\, dv\,, \qquad (5)$$

where $Q(g, p)$ is the cross section for excitation by electrons of velocity v and $f(v)$ is the Maxwellian distribution of electron velocities for temperature T_e. The calculated values of $X(g, p)$ for the ions O VI and Mg X are plotted in Figure 2. The calculated values of X for these same transitions in Ne VIII lie approximately midway between the values plotted for O VI and Mg X. In the calculations, the cross sections of Bely (1966a, b) based upon the Coulomb-Born approximation, were used for the three transitions $2s - 2p$, $2s - 3s$, and $2s - 3d$. Burke *et al.* (1966) have shown that for N V the Coulomb-Born approximation grossly underestimates the cross section of the $2s - 3p$ transition near threshold because of the neglect of the effects of close coupling between the nearly degenerate $3s$, $3p$, and $3d$ levels. They give an 'estimated' cross section for the $2s - 3p$ transition in N V which takes into account the effects of close coupling and exchange.

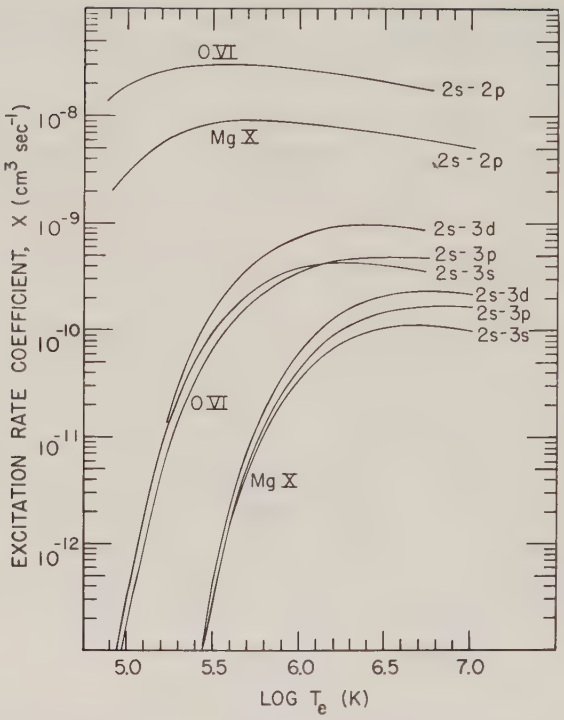


Fig. 2. Excitation rate coefficients, X, as a function of electron temperature for transitions from the $2s$ ground level to the upper levels $2p$, $3s$, $3p$, and $3d$ in O VI and Mg X. With the exception of the $2s-3p$ transition, the cross sections of Bely were used to determine the X's. For the $2s-3p$ transition, the Bely cross section at threshold was increased by a factor of about 2.

The estimated cross section at threshold is about a factor of two greater than the Coulomb-Born value. This factor was applied at threshold to the $2s-3p$ transitions for O VI, Ne VIII, and Mg X and the modified cross sections used to calculate $X(2s, 3p)$.

With the exception of the $2s-3p$ transition, the Coulomb-Born cross sections are reliable to an accuracy of about 20% at threshold and a few percent at energies well above threshold according to the estimates of error given by Burke *et al.* for N V and by Bely for the other lithiumlike ions. Because the cross sections are averaged over a distribution of electron velocities to determine the excitation rate coefficients, one might expect the calculated values of the rate coefficients to be somewhat better than 20%.

Laboratory measurements of the excitation rate coefficients of the transitions of interest here have been made recently by Boland *et al.* (1970) for N V and by Kunze and Johnston (1971) for N V, O VI and Ne VIII. The experimental absolute values of the rate coefficients agree with the values obtained from the theoretical cross sections of Burke *et al.* and Bely to within the limits of experimental error, between ± 30 to $\pm 50\%$.

The quantity $n_e^2\, dh/d\log T_e$ which is necessary to evaluate Equation (4) was obtained from the results of the analysis of the solar EUV spectrum according to the method of

Pottasch. The results of the Pottasch method of analysis for the present rocket experiment are given by Malinovsky and Heroux (1972). From this analysis, the distribution of the quantity $n(E)/n(H) \int_R n_e^2 \, dh$ with temperature for the element E is obtained, where R refers to the volume region in the solar atmosphere where the spectral line of a particular ion of the element is assumed to be emitted. The integral quantity above is equivalent to the quantity $n(E)/n(H) \int_{\Delta T/T} n_e^2 (dh/d\log T_e) \, d\log T_e$, where $\Delta T/T$ refers to the relative temperature range near T_{max} corresponding to the region R in which the spectral line is predominantly emitted. By dividing this integral by $\int d\log T_e$, one obtains the distribution of the average value $n(E)/n(H)\langle n_e^2 \, dh/d\log T_e\rangle$ with temperature for the element. This analysis can be applied to spectral lines of the ions of several elements abundant in the Sun and the data for different elements fitted to one element to give a common curve of least scatter.

The temperature distribution of the quantity $n(E)/n(H)\langle n_e^2 dh/d\log T_e\rangle$ fitted to iron is given in Figure 3. The abundances of the elements oxygen, neon, and magnesium relative to iron obtained from the fit are log (O/Fe) = 0.9, log (Ne/Fe) = 0, and log (Mg/Fe) = 0.1. Although the abundance of silicon relative to iron is not used here, it may be of interest to mention that the data in Figure 3 gives log (Si/Fe) = −0.1. The solid curve in Figure 3 together with the abundances of O, Ne, and Mg relative to iron gives the temperature dependence of the quantity $[n(E)/n(H)] \, n_e^2 \, dh/d\log T_e$ for the entire solar disc for the purpose of calculating the spectral line intensities of the lithiumlike ions O VI, Ne VIII and Mg X. The data plotted in Figure 3 were calculated by using Jordan's values of $n(i)/n(E)$ for the ions selected for analysis in applying

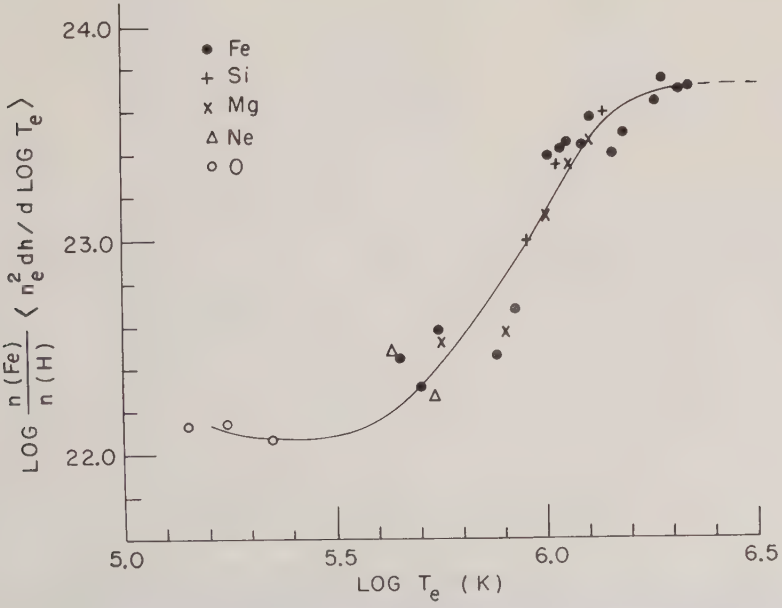


Fig. 3. The values of $n(\mathrm{Fe})/n(\mathrm{H}) \langle n_e^2 \, dh/d\log T_e \rangle$ as a function of temperature based upon the ionization equilibrium values of Jordan for ions of the indicated elements.

the Pottasch method. The lithiumlike ions were not used in the analysis to obtain Figure 3. If Allen and Dupree's values of $n(i)/n(E)$ are used in the analysis, the curve in Figure 3 is slightly modified.

The last four data points for iron plotted at the right extremity of the curve in Figure 3 were obtained from the spectral line intensities of the ions Fexiv and Fexv. Because these intensities are sensitive to the level of solar activity, the shape of the curve in Figure 3 at temperatures above about $\log T_e = 6.2$ is also sensitive to solar activity. The relatively high values of the quantity $\langle n_e^2 \, dh/d\log T_e \rangle$ from Fexiv and Fexv in the present experiment are characteristic of an active Sun. From previous work of Jordan (1966), one would expect the curve of $\langle n_e^2 \, dh/d\log T_e \rangle$ vs T_e for a quiet Sun to exhibit a peak near the points clustered about $\log T_e = 6.1$ and then decrease by a factor of about 5(0.7 dex) in the temperature region of emission of the lines of Fexiv and Fexv.

Equation (4) can now be evaluated to give the absolute intensity I of the spectral lines of the lithiumlike ions measured at the Earth. The product of the constant factors and the temperature dependent terms in the integrand of Equation (4) gives the temperature dependence of the flux $\phi(T_e)$ of the spectral lines in the solar atmosphere in units of photons $cm^{-2}\ s^{-1}\ (\Delta T/T)^{-1}$. The calculated flux for the multiplets originating

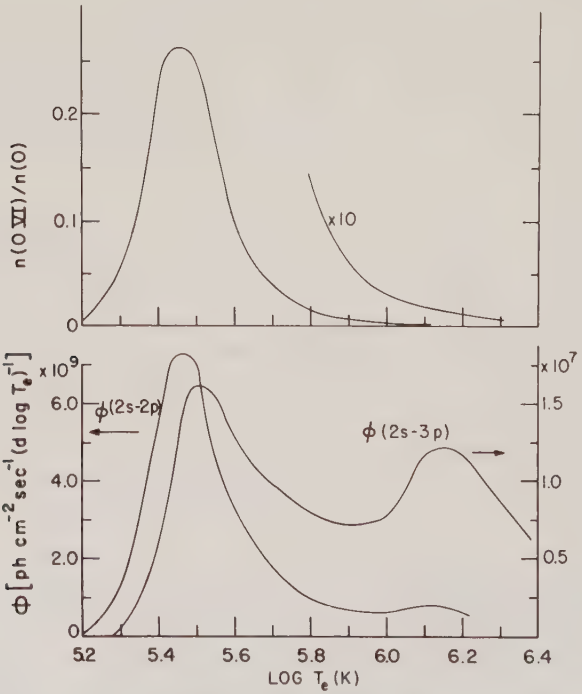


Fig. 4. The lower curves give the temperature dependence of the flux of the multiplets corresponding to the transitions $2s - 2p$ and $2s - 3p$ in O VI. The absolute values of the ϕ's are based upon Jordan's values of the ionization equilibria. The upper curve gives the quantity $n(\text{O VI})/n(\text{O})$ as a function of temperature.

from the transitions $2s-2p$ and $2s-3p$ in O VI and Mg X are plotted in Figures 4 and 5 to illustrate the gross differences that can occur in the temperature distribution of the flux of spectral lines originating from widely spaced levels of the same lithiumlike ion. Jordan's values of $n(\mathrm{O\,VI})/n(\mathrm{O})$ and $n(\mathrm{Mg\,X})/n(\mathrm{Mg})$ for the Sun and the solid curve in Figure 3 were used in the flux calculations. The flux distribution for the other two high excitation lines of the ions, the transitions $2p-3s$ and $2p-3d$, are similar to those for the $2s-3p$ transitions plotted in Figures 4 and 5, since the excitation rate coefficients for the three high excitation lines are also similar.

The calculated flux for the $2s-3p$ transition in O VI in Figure 4 clearly illustrates the pronounced effect that the quantity $n_e^2\, dh/d\log T_e$ can have on the high excitation lines of the lithiumlike ions. One can see that the flux of this multiplet is surprisingly high in the high temperature region of the solar atmosphere where the ion density is relatively very low. The flux enhancement is so large because both the rate coefficient $X(2s-3p)$ for the multiplet and $n_e^2\, dh/d\log T_e$ for the solar atmosphere are increasing rapidly in the high temperature tail of $n(\mathrm{O\,VI})/n(\mathrm{O})$. The flux of the resonance multiplet is also enhanced at high temperatures but to a lesser degree because $X(2s-2p)$ is fairly constant over the temperature region in which the ion is produced with appreciable density.

When the ion is produced over a region of temperature where $n_e^2\, dh/d\log T_e$ is no

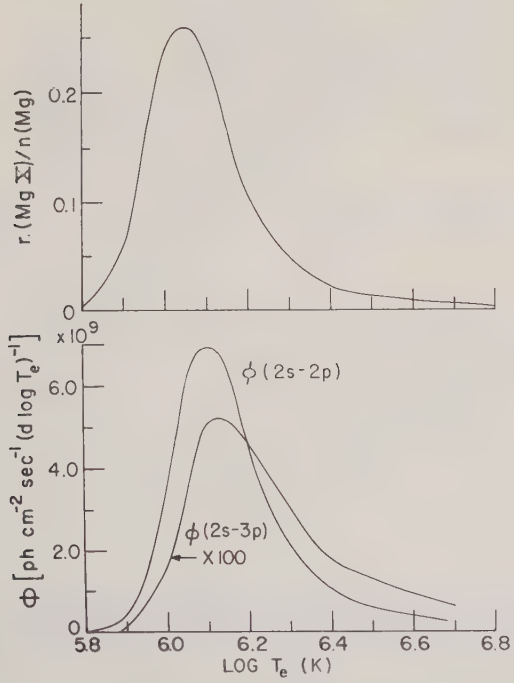


Fig. 5. The lower curves give the temperature distribution of the flux of the multiplets from the transitions $2s-2p$ and $2s-3p$ in Mg X based on Jordan's values of ionization equilibrium. The upper curve gives the dependence of the quantity $n(\mathrm{Mg\,X})/n(\mathrm{Mg})$ on temperature.

longer increasing rapidly with increasing temperature, this quantity has only a small effect on the flux distribution of the spectral lines. The ion Mgx falls in this category. As can be seen from Figure 5, the spectral lines of Mgx are emitted in similar temperature regions which are shifted only slightly relative to the region in which the ion is produced with appreciable density.

The theoretical absolute intensities I of the multiplets corresponding to the transitions $2s-2p$, $2s-3p$, $2p-3s$, and $2p-3d$ in Ovi, Neviii, and Mgx were evaluated by graphical integration of curves such as those plotted in Figures 4 and 5. These theoretical intensities and intensity ratios are compared to the experimental values in Section 5. A schematic summary of the temperature regions in which the lines are predominantly emitted in the solar atmosphere is also included in that section.

3. Experimental Techniques

A. THE SPECTROMETER

A schematic diagram of the rocket instrument used to measure the spectral line intensity ratios of Nv, Ovi, Neviii, and Mgx is shown in Figure 6. The instrument

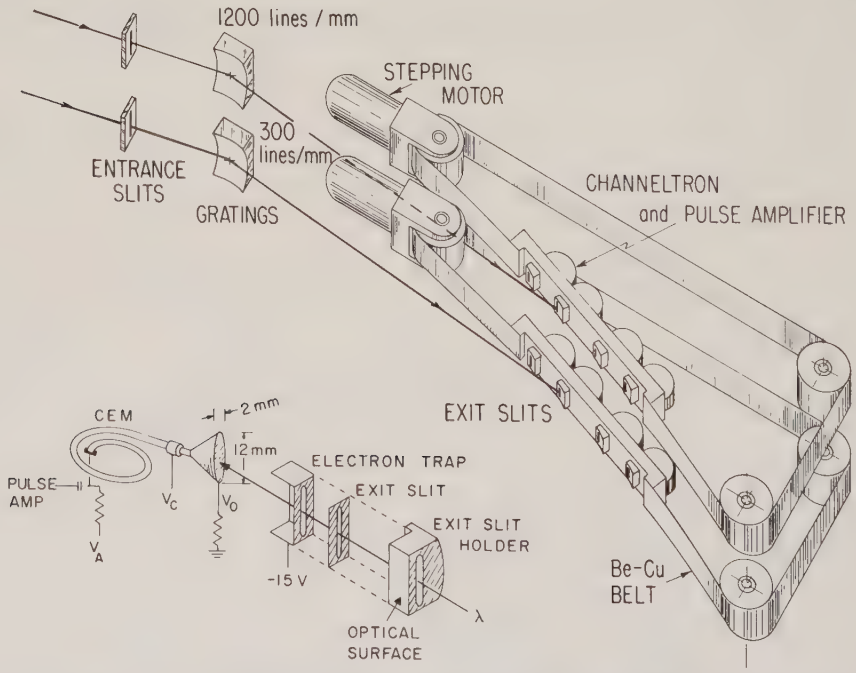


Fig. 6. Schematic of the rocket spectrometer for measuring the intensity ratios of emission lines from the lithiumlike ions Nv, Ovi, Neviii, and Mgx. The inset illustrates the assembly of each exit slit and its Bendix channeltron electron multiplier (CEM). The optical surfaces on each exit slit holder and on the entrance slit holders, not shown, are used to align the exit and entrance slits for parallelism. The operating voltages with respect to ground for plateau operation of the CEM's are $V_A = +2900$, $V_C = +500$, and $V_O = +20$. The discrimination levels of the pulse amplifiers were 25 mV.

consists of two spectrometers in a single casting to cover a wide wavelength range, and eight exit slits and channeltron photomultiplier detectors to scan different regions of wavelength simultaneously. The entrance slits and concave gratings were clamped against reference surfaces which positioned them on two Rowland circles, located one above the other. Four exit slits were located on each circle by a fixture which also allowed the slits to be moved in small steps along the circle. Bausch and Lomb gold-coated replica gratings, ruled with different spacings but otherwise identical, were used in both decks of the instrument. The gratings had a radius of curvature of 2M, a blaze angle of 4°, and were illuminated at an angle of 86° from the grating normal. One deck having a 1200 lines/mm grating had the capability of covering the wavelength range 45–325 Å, while the other deck having a 300 lines/mm grating covered the range 180–1300 Å. Only limited sections of these overall wavelength ranges were covered in the present experiment as summarized in Table I. The wavelength regions were deter-

TABLE I

Wavelength regions covered by the rocket spectrometer

Channel[a]	Wavelength range (Å)	Multiplet
1	51–101	Mg X($2s-3p$), ($2p-3d$), ($2p-3s$); Ne VIII($2s-3p$), ($2p-3d$)
2	99–160	Ne VIII($2p-3s$); O VI($2s-3p$)
3	148–220	O VI($2p-3d$), ($2p-3s$); N V($2s-3p$)
4	216–300	N V($2p-3d$), ($2p-3s$)
5	596–635	Mg X($2s-2p$)
6	750–795	Ne VIII($2s-2p$)
7	1003–1050	O VI($2s-2p$)
8	1220–1270	N V($2s-2p$)

[a] Channels 1–4 on deck equipped with 1200 lines/mm grating; channels 5–8 on deck with 300 lines/mm grating.

mined by the relative positions of the exit slits on the fixtures and by the linear distance of travel of the slits along the Rowland circle. The upper and lower wavelength limits for each deck were determined by limit switches which also triggered the reversal of the scanning direction as each end of the wavelength range was reached.

From Table I, one can see that the entire wavelength region between 51 and 300 Å was scanned by the four exit slits, labelled channels 1–4, on one deck of the spectrometer with some overlap in wavelength between adjacent channels. These channels contained the emission lines from the $n=3$ levels of the ions N V, O VI, Ne VIII, and Mg X. The entrance slit and the four exit slits on this deck were matched in width (50 μ) and produced triangular line shapes of about 0.25 Å full width at half-maximum (FWHM) which were essentially constant over the entire wavelength range. The entrance slit was 6 mm long and the exit slits about 12 mm long. The value of the FWHM, $\Delta\lambda$, for each channel was measured in the laboratory before flight and rechecked after flight by examining the line profiles of isolated solar emission lines.

Wavelength scanning during flight was accomplished by moving the four coupled exit slits in small steps along the Rowland circle. Photomultiplier counts were accumulated at each position of the slit for 80 ms, the slit moved to its adjacent position, and the cycle repeated. To scan the wavelength range covered by channels 1–4 required 1280 steps, corresponding to a linear distance of travel along the circle of 7.66 cm. The wavelength drive was programmed before launch to obtain one complete scan in wavelength centered around the peak altitude of the rocket.

Channels 5–8 on the other deck of the spectrometer covered limited regions of wavelength which bracketed the $2s-2p$ resonance multiplets of the four ions. The width of the entrance slit on this deck was 30 μ and the width of each exit slit about 45 μ which gave an experimental value of the FWHM of about 0.8 Å. The lengths of the entrance and exit slits were the same as those on the other deck (see above). The time interval used for counting was again 80 ms, while 512 steps were required to cover the wavelength range corresponding to a linear distance along the Rowland circle of 1.07 cm. The scanning time was 51 s which was short enough to insure that one complete scan through the resonance multiplets would be obtained very near peak altitude of the rocket. Several scans of each resonance multiplet were also obtained as a function of rocket altitude. The intensities obtained from these scans were used to correct the intensities measured at the peak altitude of the rocket for atmospheric absorption.

A Bendix channel electron multiplier (CEM), an electron trap, and a pulse amplifier were mechanically mounted to each exit slit assembly. The CEM's were operated as photon counters and exhibited well-defined count rate plateaus. For the short wavelength channels (1–4), the radiation illuminated the inner side wall of the cathode at an angle of incidence of 75° from the wall normal to take advantage of the increase in photoelectric yield which sets in at wavelengths below about 300 Å, as one approaches grazing angles of illumination (Rumsh *et al.*, 1960; Heroux *et al.*, 1965).

B. THE PHOTOMETRIC CALIBRATION OF THE SPECTROMETER

The photometric efficiency of the spectrometer was determined in the laboratory by recording the counting rate $N_0(\lambda)$ of the spectrometer at wavelength λ when the grating was illuminated with a photon beam $\Phi(\lambda)$ of known rate (Hinteregger, 1965). The photometric efficiency $\varepsilon(\lambda)$ is defined by the ratio $N_0(\lambda)/\Phi(\lambda)$ in counts photon^{-1}. The photon beams were produced by an auxiliary grazing incidence laboratory monochromator. Efficiencies were obtained at four wavelengths between 45 and 180 Å corresponding to nearly monochromatic sections ($\Delta\lambda \approx 0.5$ Å) of the characteristic X-ray bands of C, Mo, Be, and Al, and at several wavelengths between 237 and 1236 Å corresponding to monochromatic emission lines of the gases H, He, Ne, Ar, and Kr. Between 45–180 Å, $\Phi(\lambda)$ was determined by inserting a gas-flow Geiger-Mueller counter with a thin window directly into the photon beam between the entrance slit and grating of the rocket spectrometer. This counter was essentially identical to one used by Manson (1967) in a rocket spectrometer to measure fluxes between 30–130 Å. For the discrete wavelengths between 237 and 1236 Å, $\Phi(\lambda)$ was determined by inserting a

tungsten reference cathode of known photoelectric yield (Samson, 1964; Heroux and Cohen, 1968) into the photon beam.

The photometric efficiency of the spectrometer was also measured near 45 Å by using undispersed radiation from the carbon K emission band to illuminate the grating of the rocket spectrometer. The same Geiger-Mueller counter used above was operated as a proportional counter to obtain the total flux in the emission band incident on the grating (Caruso and Neupert, 1965; Manson, 1967).

Figure 7 illustrates the results of the photometric calibration of the short wavelength deck, channels 1–4, of the rocket spectrometer. The data in Figure 7 have been normalized to take into account the different quantum efficiencies of the four channeltrons. The normalization was carried out with respect to channel 4. Thus the efficiency values for channel 4 are absolute while the values for channels 1, 2, and 3 were obtained from absolute values that were corrected by a factor which is the ratio of the quantum efficiency of the channeltron to the quantum efficiency of the channeltron of channel 4. The relative quantum efficiencies of the adjacent channeltrons were obtained by comparing the counting rate of solar emission lines common to two channels. This proce-

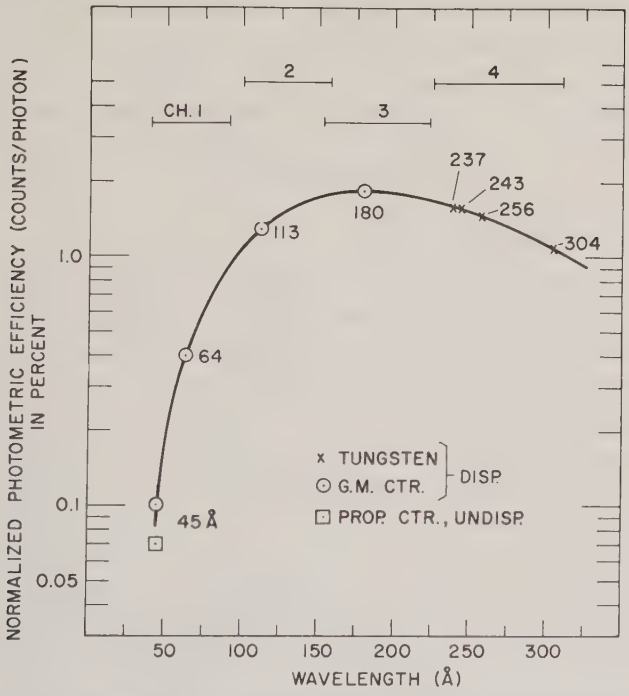


Fig. 7. The photometric efficiency of one deck of the spectrometer equipped with a Bausch and Lomb grating, 1200 lines/mm. The horizontal lines give the wavelength ranges of the four channels during calibration. The data are normalized with respect to channel 4. The efficiencies measured with the tungsten cathode and the Geiger-Mueller counter were obtained by using dispersed monochromatic radiation from a grazing incidence (87 deg angle of illumination) laboratory monochromator. The single measurement with respect to the proportional counter was obtained by using undispersed radiation from the carbon K emission band near 45 Å.

dure was necessary to establish the shape of the smooth curve through the limited number of calibration points below 200 Å.

The estimated errors of the photometric calibration for channels 1–3, measured with the G-M counter, is $\pm 15\%$, and, for channel 4, measured with respect to tungsten, $\pm 20\%$. The error for the proportional counter measurement in Figure 7 is estimated as $\pm 20\%$. This measurement therefore agrees with the G-M counter measurement, within the limits of the experimental errors. For the long wavelength deck of the monochromator (Channels 5–8), several strong emission lines were available for calibration within or very near each channel. The errors in efficiency for channels 5–8 were due predominantly to the uncertainty in the absolute photoelectric yield of the tungsten reference cathode. These errors were assumed to be $\pm 15\%$ for channels 5–7 and $\pm 20\%$ for channel 8.

C. FLIGHT DATA

The spectrometer was flown in an Aerobee 150 rocket from White Sands Missile Range, New Mexico on 4 April 1969 at 1935 UT reaching a peak altitude of 247 km. A Ball Brothers Research Corp. SPC-300 biaxial pointing control pointed the spectrometer at the Sun with a solar zenith angle of 27°. Radiation from the entire solar disc was measured. The magnitude of the 10.7 cm solar flux was 177.3×10^{-22} W m^{-2} Hz^{-1}. Although no solar flares occurred during the flight, an active region in the NW quadrant of the Sun was evident from images of the Sun in Hα and Ca-K radiation.

4. Experimental Results

4. 1. GENERAL REDUCTION OF THE DATA

Figure 8 gives the smoothed but otherwise raw data obtained from one spectral scan of the three channels which contain the $2s$-$2p$ resonance multiplets of O VI, Ne VIII, and Mg X. The general features of the multiplets which originate from the $3s$, $3p$, and $3d$ levels of the lithiumlike ions are illustrated in Figures 9 and 10, where the photomultiplier counts in regions of wavelength containing the multiplets of the transition $2s-3p$, $2p-3s$, and $2p-3d$ in O VI and $2s-3p$ and $2p-3s$ in Ne VIII are plotted. The vertical lines above the multiplets of the lithiumlike ions give the expected wavelength positions of the components of the multiplets and the relative intensities of the lines within the multiplets, if we assume that the levels of the upper terms are populated only by electron excitation from the $2s$ ground level. The wavelength scales in Figure 8 were established by using the solar wavelengths of Burton and Ridgeley (1970), while those in Figures 9 and 10 were established by using the grating equation and the positions of two solar emission lines (not the spectral lines of the lithiumlike ions) of known wavelength which fell within the channel. The $\Delta\lambda$'s indicated in Figures 9 and 10 are experimental instrumental line widths (FWHM) for a monochromatic emission line, which would produce a triangular line shape for perfectly matched and aligned entrance and exit slits.

The absolute intensities of the spectral lines of O VI, Ne VIII, and Mg X are given in

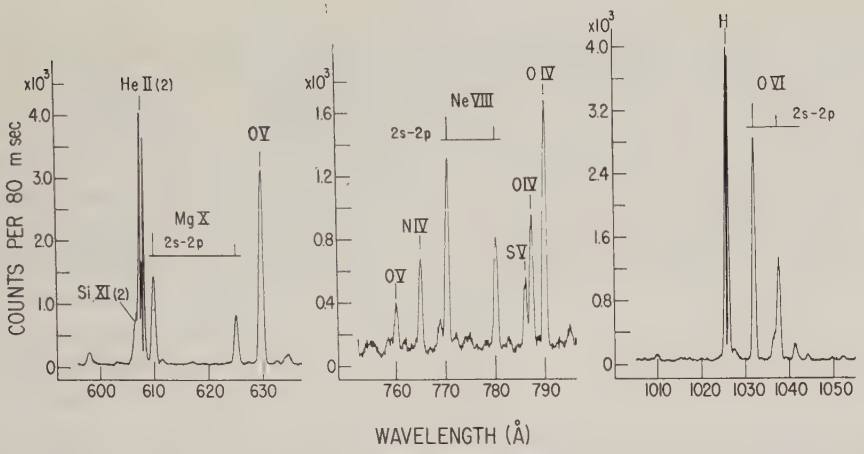


Fig. 8. Spectral scans through regions of wavelength that contain the resonance multiplets of O VI, Ne VIII, and Mg X. The predicted relative intensities of the two components of the multiplet from the $2s - 2p$ transition are indicated by vertical lines. The folding of the data for He II (2) and H-Lyman β is not significant and occurs when the accumulated counts exceed 4096.

TABLE II

Experimental absolute intensities of the emission lines of the lithiumlike ions

Ion	Wavelength (Å)[a]	Multiplet	J_l	J_u	Intensity in 10^6 ph cm^{-2}s^{-1}
O VI	1037.64	$2s\ ^2S - 2p\ ^2P$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$1480 \pm 15\%$
	1031.92		$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	$2950 \pm 15\%$
	184.06	$2p\ ^2P - 3s\ ^2S$	$\frac{1}{2}, \frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$19 \pm 25\%$
	173.03	$2p\ ^2P - 3d\ ^2D$	$\frac{1}{2}, \frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}, \frac{5}{2}$	$32 \pm 20\%$
	150.10	$2s\ ^2S - 3p\ ^2P$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{3}{2}$	$20 \pm 20\%$
Ne VIII	780.28	$2s\ ^2S - 2p\ ^2P$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	200[b,e]
	770.42		$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	$340 \pm 15\%$[e]
	103.05	$2p\ ^2P - 3s\ ^2S$	$\frac{1}{2}, \frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$4.5 \pm 25\%$
	88.13	$2s\ ^2S - 3p\ ^2P$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{3}{2}$	13[c]
Mg X	624.91	$2s\ ^2S - 2p\ ^2P$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$308 \pm 20\%$[d,f]
	609.82		$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	$623 \pm 20\%$[d,f]
	65.80	$2p\ ^2P - 3s\ ^2S$	$\frac{1}{2}, \frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$9.5 \pm 25\%$
	63.25	$2p\ ^2P - 3d\ ^2D$	$\frac{1}{2}, \frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}, \frac{5}{2}$	$17 \pm 25\%$
	57.89	$2s\ ^2S - 3p\ ^2P$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{3}{2}$	$10 \pm 25\%$

[a] Wavelength of $2s - 2p$ resonance multiplet from Burton and Ridgeley (1970); for the remaining multiplets, the wavelengths are from the averaged weighted energy levels (Wiese *et al.*, 1966).
[b] Blended with fourth order Fe XII.
[c] Possibly blended with Fe XI.
[d] Possibly blended with O IV.
[e] 5% correction applied for atmospheric absorption.
[f] 15% correction applied for atmospheric absorption.

Table II. The transition $2p-3d$ of Ne VIII at 98.3 Å is omitted in the table because it is obvious from the data that the multiplet is blended. As indicated in the table, some of the other tabulated lines are believed to be blended. The grounds for indicating blending will be discussed below in more detail for each ion species. The intensities of both components of the $2s$-$2p$ resonance multiplet are given in the table, since the components are well separated in wavelength. For the remaining short wavelength multiplets from the $3s$, $3p$, and $3d$ levels, the total intensity of the multiplet is given since the components of the multiplets cannot be resolved with the present instrument. The intensities were obtained by dividing the counting rate of the spectral line or multiplet by the product of the photometric efficiency of the spectrometer and the area of the entrance slit. The counting rate was obtained by summing the counts per 80 ms recorded at each position of the exit slit as the slit scanned through the line and dividing the sum by the steps required to scan through the instrumental line width $\Delta\lambda$. The count sample obtained by this method is large and therefore the statistical error of the count sample small.

The intensities of the resonance multiplets ($2s-2p$ transition) were obtained from data acquired between 246 and 247 km. Corrections of 5% and 15%, respectively, were applied to the data of Ne VIII and Mg X to account for atmospheric absorption (Hall, 1970). The uncertainties in the absolute intensities of the components of the resonance multiplets that are free from blending are estimated as $\pm 15\%$, the uncertainties being due chiefly to errors in the photometric calibration and smaller errors introduced in the determination of the number of steps corresponding to $\Delta\lambda$ and the area of the entrance slit. The intensities of the multiplets from the $n=3$ levels of the ions were obtained from data acquired over an altitude range 230–247 km. It has been assumed that atmospheric absorption of the multiplets which fall in wavelength between about 57 and 184 Å is negligible over this altitude range. The errors estimated for the absolute intensities of the short wavelength multiplets given in the table arise primarily from uncertainties in the photometric calibration and in uncertainties introduced by background.

4. 2. Relative Intensities of the Components of the Multiplets

The relative intensity of the two components $2s\ ^2S_{1/2}-2p\ ^2P_{1/2,3/2}$ of the resonance multiplets would be expected to be given by the relative line strengths (2/1) of the components provided the $^2P_{1/2,3/2}$ levels are populated only by electron excitation from the $2s\ ^2S_{1/2}$ ground level. An accurate experimental determination of this ratio would therefore provide an important verification of the excitation processes assumed in the present study. In principle, a measurement of the doublet ratio for the lithiumlike ions is possible since the components of the multiplet are intense and clearly separated from one another, but are still close enough in wavelength so that both the photometric efficiency of the spectrometer and the instrumental line width can be assumed to be constant over the small wavelength range spanned by the doublet. Photoelectric scans through the resonance multiplets of several lithiumlike ions have been made previously in rocket and satellite experiments (Hall *et al.*, 1963; Higgins, 1968; Dupree

and Reeves, 1971). However, because of blending of either one or both components of the multiplets, a measurement of the relative intensities of the components has not been possible in the past. Because of the higher spectral resolution available here, the doublet ratios for O VI, Ne VIII, and Mg X can now be investigated with higher accuracy.

The resolution of the present spectrometer is not sufficient to separate completely the components of the multiplets of the transitions $2s-3p$, $2p-3s$, and $2p-3d$. However, the unresolved conponents can often be seen with enough detail in the shape of the multiplet to give an approximate measure of the relative intensities of the multiplet components. This information is helpful in establishing whether or not the multiplet is free of blending.

4.2.1. O VI

Because the C II lines at 1037.02 and 1036.33 Å (Tousey *et al.*, 1965) can now be separated from the component of the resonance multiplet of O VI at 1037.61 Å (Figure 8), the intensity ratio of this resonance doublet can be measured. The experimental ratio for the O VI doublet measured here (see Table II) is 2.00 ± 0.08, where the indicated error is the rms error of the ratio measurement. The error includes the statistical errors in counting, the error in correcting for the neighboring C II lines, and a possible error in the relative photometric efficiency of the spectrometer for the wavelength range spanned by the components of the multiplet. The experimental ratio for the resonance multiplet of O VI is therefore in excellent agreement with the predicted ratio of 2/1.

The unresolved components of the $2s-3p$ multiplet of O VI can be seen in Figure 9 to produce a slightly broadened profile near 150 Å. The two components of the $2p-3d$ multiplet are clearly visible in the shape of the multiplet near 173 Å because of their wider

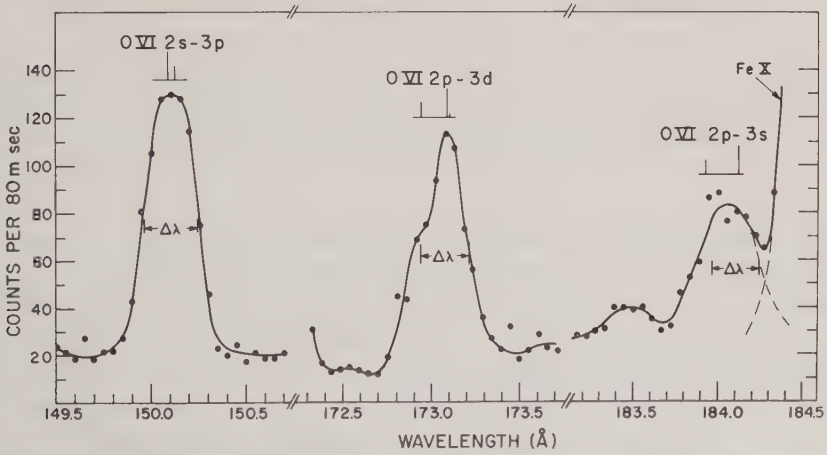


Fig. 9. Spectral scans in regions of wavelength that contain the multiplets of the transitions $2s-3p$, $2p-3d$, and $2p-3s$ in O VI. The predicted relative intensities of the components of the multiplets are indicated by vertical lines. The instrumental line width (FWHM) for a monochromatic emission line is indicated by $\Delta\lambda$. The solid lines are used only as a visual aid to connect the measured points.

separation. The broad feature at 184 Å is assumed to originate from the two components of the $2p-3s$ multiplet. The scatter in the measured points for this multiplet is rather large owing to the small count samples so that the components of the multiplet are obscured. However, the observed width appears to be correct for the two relatively widely spaced components.

4.2.2. Ne VIII

The experimental ratio for the resonance doublet of Ne VIII is less that 2/1 because of a blend of the 780.32 Å component with the fourth-order component of the intense line Fe XII 195.14 Å (Freeman and Jones, 1970). This source of interference was assumed because the structure seen in the spectral scan in Figure 8 near 769, 772 and 774 Å coin-

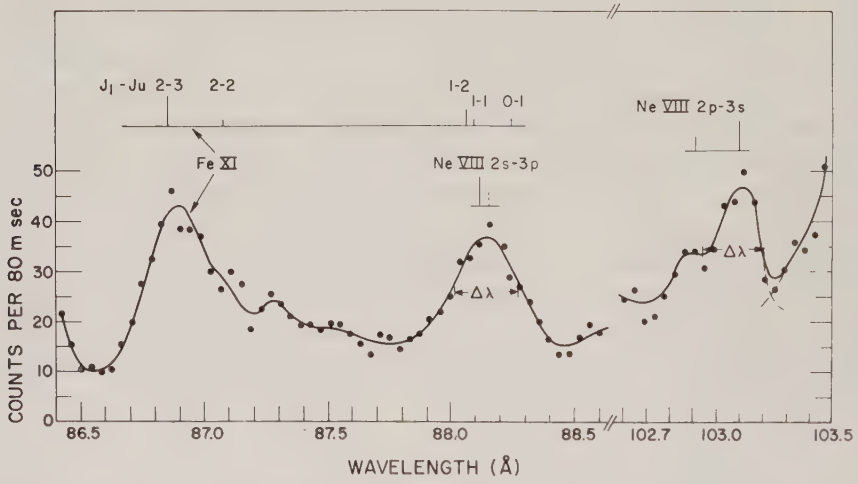


Fig. 10. Spectral scans in the neighborhood of the multiplets of the transitions $2s-3p$ and $2p-3s$ in Ne VIII. The intensities of the components of the $3p^4\ ^3P-3p^3\ 4s\ ^3D$ multiplet of Fe XI assuming statistical populations of the levels of the upper and lower terms are included to illustrate a possible source of blending for the $2s-3p$ multiplet of Ne VIII.

cides with the fourth-order components of the lines Fe XII 192.42 Å, Fe XI 192.87 Å, and Fe XII 193.53 Å which are also intense in the solar spectrum.

It would appear that the relatively strong feature in the spectral scan near 88.1 Å (Figure 10) is the multiplet of the $2s-3p$ transition in Ne VIII. However, there is some question about the composition of this feature at 88.1 Å, since its position coincides in wavelength with the $2s-3p$ transition of Ne VIII and with the three components of the Fe XI multiplet $3p^4\ ^3P-3p^3\ 4s\ ^3D$ which terminate on the excited levels $^3P_{1,0}$ of the ground term. One component of the Fe XI multiplet which terminates on the ground level, the component $^3P_2-{}^3D_3$, can be seen to be fairly intense near 86.88 Å. Widing and Sandlin (1968) have suggested that $\frac{1}{3}$ of the flux of the line near 88.1 Å may be due to the three long wavelength components of the Fe XI multiplet. However, it has been

pointed out by Gabriel *et al.* (1965) that because of the low electron density in the solar atmosphere, the components of a multiplet from levels which are populated by electron collisions from excited levels of the ground term will be less intense in the Sun than in sources in which the levels of the ground term are statistically populated. For this reason, Fawcett *et al.* (1968) have identified the line near 88.1 Å as the $2s-3p$ transition in Ne VIII. The experimental intensity ratio for Ne VIII that includes this multiplet in the ratio also indicates that the feature near 88.1 Å is a blend, although it is not necessarily a blend with the emission lines of Fe XI. This will be discussed further in Section 5.

There is apparently no controversy concerning the $2p-3s$ multiplet of Ne VIII near 103.1 Å. It can be clearly distinguished in Figure 10 although its intensity is relatively weak and it is situated in the wing of a strong line of Fe IX at 103.58 Å.

The $2p-3d$ multiplet of Ne VIII near 98 Å, not shown here, appears to be relatively strong, but it is clearly blended with two other solar emission lines which bracket the multiplet.

4.2.3. Mg X

As can be seen in Figure 8, the resonance multiplet of Mg X is clearly separated from the Lyman α transition of He II in the second order and from the resonance transition of O V. The doublet of Mg X has always been assumed to be free of blending when observed photographically with high spectral resolution (Burton and Ridgeley, 1970; Freeman and Jones, 1970). The photoelectric data in Table II indicate that the doublet ratio is 2.03 ± 0.04. We believe, however, that this good agreement between the experimental and predicted ratio may be fortuitous, since both components of the Mg X resonance multiplet are possibly blended with spectral lines of O IV. The stronger component of the Mg X doublet at 609.83 Å coincides in wavelength with the transition to the upper level of the ground term of O IV, the $2s^2\,2p\,{}^2P_{3/2}-2s\,2p^2\,{}^2S_{1/2}$ line at 609.83 Å. The transition to the ${}^2P_{1/2}$ ground level of O IV at 608.40 Å lies in the wing of the strong He II line in second order and therefore cannot be used to establish the importance of the interfering line at 609.8 Å. However, an estimate of the intensity of the interfering line can be obtained by using the intensity of another multiplet of O IV, the line ${}^2P_{1/2}-{}^2D_{3/2}$ at 787.71 Å and the lines ${}^2P_{3/2}-{}^2D_{3/2,\,5/2}$ at 790.10 and 790.20 Å clearly seen in Figure 8, and the f-values of 0.07 and 0.095, respectively, for the ${}^2P-{}^2S$ and ${}^2P-{}^2D$ multiplets (Weiss, 1971). This estimate indicates that 10–20% of the intensity assigned to the Mg X-609.8 Å line in Table II could be due to the O IV-609.8 Å line. The weaker component of the Mg X doublet at 624.91 Å could also be blended with the $2s\,2p^2\,{}^4P-2p^3\,{}^4S$ multiplet of O IV thus accounting for the apparent ratio near 2/1. This multiplet which terminates on the metastable term of O IV has three components which bracket the Mg X-624.9 Å line.

The signals for the three short-wavelength multiplets of Mg X, not shown here, are generally weak, and the scatter in the data appears to be similar to that of the $2p-3s$ transition of Ne VIII, shown in Figure 10. The multiplets of Mg X seem to be free of blending, since the components of the multiplets have the expected relative intensities.

5. Discussion

A comparison of the theoretical and experimental intensity ratios for O VI, Ne VIII, and Mg X is presented in Table III. Two sets of calculations are tabulated. One set is based upon Jordan's values of $n(i)/n(E)$ for the Sun while the other set is based upon Allen and Dupree's values for a low density plasma. Both sets of calculations for

TABLE III

Comparison of theoretical and experimental intensity ratios

Ion	$I(2s-2p)/I(2s-3p)$			$I(2s-2p)/I(2p-3s)$			$I(2s-2p)/I(2p-3d)$		
	Exp.	Theor.[a]	Theor.[b]	Exp.	Theor.[a]	Theor.[b]	Exp.	Theor.[a]	Theor.[b]
O VI	220 ± 60	200	140	230 ± 80	180	130	140 ± 40	100	70
Ne VIII				110 ± 35	140	100			
Mg X	100 ± 30	110	90	100 ± 30	120	110	60 ± 20	70	60

[a] Ionization equilibria of Jordan (1969) used to calculate ratio.
[b] Ionization equilibria of Allen and Dupree (1969) used to calculate ratio.

$n(i)/n(E)$ include the effects of dielectronic recombination and auto-ionizing processes. In Jordan's calculations for the Sun, dielectronic recombination has been reduced to account for the variation of electron density in the solar atmosphere. In those of Allen and Dupree, full dielectronic recombination was used to determine $n(i)/n(E)$. In comparison to the values of Jordan, the values of $n(i)/n(E)$ of Allen and Dupree are shifted toward higher temperatures by about 0.1 dex and are somewhat lower in magnitude. Both sets of calculated ratios for Ne VIII and Mg X are similar and are in good agreement with the experimental ratios. For O VI, the agreement between the experimental and theoretical ratios appears to be better when Jordan's values of $n(i)/n(E)$ are used to calculate the ratios. However, the theoretical ratios for O VI are subject to large uncertainties and the results for this ion in Table III probably should not be used as a basis to evaluate the relative accuracies of the two sets of calculations of $n(i)/n(E)$ vs T_e, which do not differ significantly from one another. The uncertainty in the theoretical ratios for O VI is expected to be large because the ratios are particularly sensitive to the experimentally determined quantity $n_e^2\, dh/d\log T_e$ and to the ion density in the tail of the distribution of $n(i)/n(E)$ where the density is very low. Extrapolated values for both of these quantities at $\log T_e$ greater then about 6.3 were used to calculate the ratios for O VI in Table II.

The ratios listed in Table III were also calculated by using the earlier theoretical values of $n(i)/n(E)$ vs T_e of House (1964) in which dielectronic recombination was not included as a process in establishing ionization balance. According to this calculation the ionization temperatures of the ions studied here are a factor of about two (0.3 dex) less than the ionization temperatures of Allen and Dupree. The neglect of dielectronic recombination also sharpens the temperature distribution of $n(i)/n(E)$ at temperatures beyond the peak value of the ion density, so that the calculated flux enhancement of

the spectral lines at high temperatures is also less. If the values of House are used to calculate the ratios, it is found that the theoretical ratios are higher than the experimental ratios by a factor of about 2 for O VI and about 5 for Ne VIII and Mg X.

The ratio $I(2s-2p/I(2s-3p)$ for Ne VIII is not included in Table III because the multiplet corresponding to the $2s-3p$ transition appears to be blended. The experimental ratio (see Table II) is about 40 while the theoretical ratio is similar to that given for $I(2s-2p/I(2p-3s)$ of Ne VIII in Table III. This large difference in the experimental and theoretical ratio would indicate that about $\frac{1}{3}$ of the signal recorded for the spectral line at 88.1 Å shown in Figure 10 and listed in Table II is due to Ne VIII.

It is of some interest to compare the theoretical absolute intensities of the spectral lines of the lithiumlike ions with their experimental values, since the theoretical intensities, unlike the ratios, depend upon the abundances of the elements O, Ne, and Mg relative to Fe. A comparison of the theoretical and experimental intensities, therefore, would verify the validity of the method used to calculate the intensity ratios. The experimental intensities and the intensities calculated from Jordan's values of ionization equilibria are given in Table IV. One can see from the table that the ex-

TABLE IV

Comparison of theoretical and experimental absolute intensities in units of 10^6 ph $cm^{-2}s^{-1}$

Transition	O VI		Ne VIII		Mg X	
	Exp.	Theor.[a]	Exp.	Theor.[a]	Exp.	Theor.[a]
$2s-2p$	4400 ± 700	2200	510 ± 80	610	930 ± 190	1900
$2p-3s$	19 ± 5	13	4.5 ± 1	4.5	9.5 ± 2.5	15
$2p-3d$	32 ± 6	23			17 ± 4	28
$2s-3p$	20 ± 4	11			10 ± 2.5	18

[a] Calculation based on ionization equilibria of Jordan (1969).

perimental and theoretical intensities are in good agreement for the spectral lines of Ne VIII and agree to within a factor of about 2 for O VI and Mg X. The discrepancies in the experimental and theoretical intensities for the different spectral lines of both O VI and Mg X are approximately constant indicating that they may be partially accounted for by uncertainties in the abundances of O and Mg relative to Fe. A factor of about 2 is the magnitude of error expected for the determination of the abundance of the element from the Pottasch method.

A summary of the calculations of the temperature distribution of the flux of the spectral lines analyzed here is given schematically in Figure 11. The lowest horizontal bar in the figure gives the temperature region over which $n(i)/n(E)$ is greater than 50% of its peak value according to Jordan. The temperature of the peak of $n(i)/n(E)$ is also indicated on this bar. The remaining bars in the figure give the temperature regions in which 50% of the theoretical flux of the spectral lines are emitted, where the bars have been centered in temperature about the mean values of log T_e for the flux distribution. The fluxes are based upon Jordan's ionization equilibrium calculations. Except for a

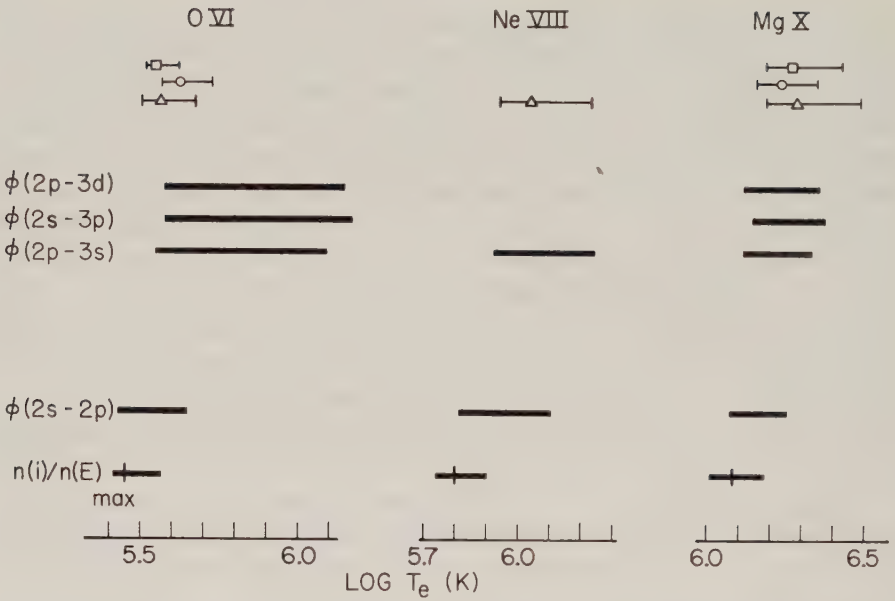


Fig. 11. A schematic illustrating the theoretical temperature distribution of the ionization equilibrium $n(i)/n(E)$ for the ions O VI, Ne VIII, and Mg X and the flux ϕ of the multiplets of these ions corresponding to the transitions $2s-2p$, $2p-3s$, $2s-3p$, and $2p-3d$. The lowest bar for each ion gives the temperature region where $n(i)/n(E)$ is greater than 50% of its maximum value according to Jordan. The remaining heavy bars give the temperature regions in the solar atmosphere in which 50% of the intensity of the indicated multiplet is calculated to be emitted. For comparison, the experimental temperatures obtained by using density-independent spectral line intensity ratios for the three ions are given at the top of the figure. The symbols refer to the intensity ratios:
$\triangle$, $I(2s-2p)/I(2p-3s)$; $\bigcirc$, $I(2s-2p)/I(2s-3p)$;
$\square$, $I(2s-2p)/I(2p-3d)$.

slight shift along the temperature axis, the fluxes calculated by using Allen and Dupree's values of $n(i)/n(E)$ vs T_e are similar to the values plotted in Figure 11.

The remaining points plotted with error bars at the top of Figure 11 are experimental temperatures obtained by using the theoretical density-independent ratios $R(T_e)$ for the ions (Heroux and Cohen, 1971). As mentioned in Section 1 of the present paper, these temperature measurements are valid only if the spectral lines comprising the ratio are emitted from approximately the same temperature region in the solar atmosphere. It is apparent from the ϕ's plotted in Figure 11 that, although the experimental temperatures for O VI are not significant, those for Ne VIII and especially those for Mg X should give a fairly reliable measure of the spectral line emission temperatures. These experimental temperatures for Ne VIII and Mg X do support the theoretical flux distribution predicted by the ionization equilibrium calculations of both Jordan and Allen and Dupree.

Although the experimental temperatures in Figure 11 can be difficult to interpret when the spectral lines are emitted over a broad temperature region, a comparison of the three experimental temperatures of a given ion can still provide an indication of

the relative accuracy of the excitation cross sections that were used to evaluate $R(T_e)$. The error bars in the experimental temperatures, given in Figure 11, originate predominantly from the uncertainty in the photometric calibration of the spectrometer. The relative errors in the experimental temperatures derived from the three intensity ratios of a given ion, however, are not significantly influenced by the calibration errors, because the resonance multiplet is common to the three ratios and the short wavelength multiplets are near in wavelength. The scatter in the values of T_e for O VI and Mg X, plotted in Figure 11, therefore indicates the relative accuracies of the cross sections that were used to calculate the ratios $R(T_e)$. Because the $2s-2p$ resonance transition is common to the three intensity ratios, the three measurements permit an effective comparison of the cross sections for electron excitation between the ground term and the upper terms $3s$, $3p$, and $3d$. As can be seen from Figure 11, the agreement among the three measurements for O VI and Mg X is good. This agreement indicates that the scaling procedure, used here (Section 2) to adjust the threshold values of the Coulomb-Born cross sections of Bely for the $2s-3p$ transitions is necessary. If the unmodified Coulomb-Born cross sections of Bely are used to calculate the intensity ratio $I(2s-2p)/I(2s-3p)$ for O VI and Mg X, the experimental temperatures for this ratio (open circles in Figure 11) would be shifted toward higher temperatures by about 0.2 dex.

6. Conclusions

The experimental intensity ratios of the spectral lines of O VI, Ne VIII, and Mg X emitted from the whole solar disc are in good agreement with the ratios calculated by using the ionization equilibrium values of $n(i)/n(E)$ versus T_e in which dielectronic recombination is included as a process to establish ionization balance (Allen and Dupree, 1969; Jordan, 1969). The quantity $n_e^2\, \mathrm{d}h/\mathrm{d}\log T_e$ versus T_e for the solar disc must be taken into account when the intensity ratios of the lithiumlike ions are calculated, since this quantity can have an important effect on the temperature distribution of the flux of the spectral lines. When the effect of $n_e^2\, \mathrm{d}h/\mathrm{d}\log T_e$ on the temperature profiles of the lines of an ion is small, a direct measurement of an electron temperature can be obtained from the experimental intensity ratios of the spectral lines of the lithiumlike ion. In the present experiment, a temperature measurement was possible for the coronal ion Mg X. The experimental temperature was found to be in very good agreement with the temperature of maximum emission of the spectral lines of Mg X predicted by the theoretical values of ionization equilibrium of both Allen and Dupree and Jordan.

The basic assumption that the steady-state population densities of the bound levels of the lithiumlike ions are established only by electron excitation from the ground level followed by radiative decay is supported by two experimental observations. First the rates of the two most important cascading transitions into the $2p$ level of O VI and Mg X are negligible since they contribute only about 1% to the population of that level. Second, the relative intensities of the components of the $2s-2p$ resonance doublet of O VI are in good agreement with the relative intensities predicted by the assumed excitation mechanism. The relative intensities of the resonance multiplet of Mg X also

confirm the excitation mechanism, but there is the possibility that both components of the doublet may be blended. The present study also indicates that the Coulomb-Born excitation cross sections of Bely for the $2s-3p$ transitions in the lithiumlike ions should be increased at threshold by a factor of about 2 to account for the effects of close coupling and exchange as proposed by Burke *et al.* for N v. If this correction is applied, the excitation rate coefficients $X(2s-3s)$, $X(2s-3p)$, and $X(2s-3d)$ of ions in the lithiumlike sequence derived from the cross sections of Bely (1966a, b) would appear to have a relative accuracy of better than 10%.

Acknowledgements

We wish to thank R. W. P. McWhirter of the Astrophysical Research Unit, Culham Laboratory for several theoretical discussions and T. J. L. Jones of the same laboratory who set up the new calibration facilities at Air Force Cambridge Research Laboratories (AFCRL) while he was on leave of absence from Culham. We also thank our colleagues at AFCRL, D. E. Bedo, C. W. Chagnon, L. A. Hall, J. E. Higgins, and J. E. Manson for their advice and help, and R. G. Newburgh for a detailed criticism of the manuscript. We are particularly grateful to J. E. Manson for his advice on the design and operation of the G-M and proportional counters. The mechanical design and construction of the rocket instrument was directed by J. F. McGrath and J. Padur of Comstock and Wescott, Inc., Cambridge, Mass. The electronic instrumentation was developed by R. Hills and E. Zeuli of Adcole Corporation, Waltham, Mass.

Part of this manuscript was prepared while one of the authors (LH) was on leave of absence at the Laboratoire de Physique Stellaire et Planétaire. This author would like to thank R. M. Bonnet of LPSP for the hospitality extended by his laboratory during the course of the visit.

References

Allen, J. W. and Dupree, A. K.: 1969, *Astrophys. J.* **155**, 27.
Bely, O.: 1966a, *Proc. Phys. Soc.* **88**, 587.
Bely, O.: 1966b, *Ann. Astrophys.* **29**, 683.
Boland, B. C., Jahoda, F. C., Jones, T. J. L., and McWhirter, R. W. P.: 1970, *J. Phys. B.* **3**, 1134.
Burke, P. G., Tait, J. H., and Lewis, B. A.: 1966, *Proc. Phys. Soc.* **87**, 209.
Burton, W. M. and Ridgeley, A.: 1970, *Solar Phys.* **14**, 3.
Caruso, A. J. and Neupert, W. M.: 1965, *Appl. Opt.* **4**, 247.
Dupree, A. K. and Reeves, E. M.: 1971, *Astrophys. J.* **165**, 599.
Fawcett, B. C., Peacock, N. J., and Cowan, R. D.: 1968, *J. Phys. B.* **1**, 295.
Freeman, F. F. and Jones, B. B.: 1970, *Solar Phys.* **15**, 288.
Gabriel, A. H., Fawcett, B. C., and Jordan, C.: 1965, *Nature* **206**, 390.
Hall, L. A., Damon, K. R., and Hinteregger, H. E.: 1963, *Space Research* **3**, North Holland Publishing Co., Amsterdam, p. 745.
Hall, L. A.: 1970, Private communication.
Heroux, L.: 1964, *Proc. Phys. Soc.* **83**, 121.
Heroux, L., Manson, J. E., Hinteregger, H. E., and McMahon, W. J.: 1965, *J. Opt. Soc. Am.* **55**, 103.
Heroux, L. and Cohen, M.: 1968, *Calibration Methods in the Ultraviolet and X-Ray Regions of the Spectrum*, ESRO Report No. SP-33, European Space Research Organization, Paris, France, p. 125.
Heroux, L. and Cohen, M : 1971, *Phil. Trans. Roy. Soc. London* **A 270**, 99.

Higgins, J. E.: 1968, Environmental Research Paper No. 280 (AFCRL-68-0009), Air Force Cambridge Research Laboratories, Bedford, Mass.
Hinteregger, H. E.: 1965, *Space Sci. Rev.* **4**, 461.
House, L. L.: 1964, *Astrophys. J., Suppl. Ser.* **8**, 307.
Jordan, C.: 1966, *Monthly Notices Roy. Astron. Soc.* **132**, 463.
Jordan, C.: 1969, *Monthly Notices Roy. Astron. Soc.* **142**, 501.
Kelly, R. L.: 1968, *Atomic Emission Lines below 2000 Å, Hydrogen through Argon*, U.S. Government Printing Office, Washington, D.C.
Kunze, H. J. and Johnston, W. D.: 1971, *Phys. Rev.* **3**, 1384.
Malinovsky, M. and Heroux, L.: 1972, to be published.
Manson, J. E.: 1967, *Astrophys. J.* **147**, 703.
Pottasch, S. R.: 1964, *Space Sci. Rev.* **3**, 816.
Rumsh, M. A., Lukirskii, A. P., and Shchemelev, V. N.: 1960, *Sov. Phys. Dokl.* **5**, 1231.
Samson, J. A. R.: 1964, *J. Opt. Soc. Am.* **54**, 6.
Schwob, J. L.: 1964, *J. Phys.* **25**, 713.
Tousey, R., Austin, W. E., Purcell, J. D., and Widing, K. G.: 1965, *Ann. Astrophys.* **28**, 755.
Weiss, A. W.: 1970, *Beam-Foil Spectroscopy*, North Holland Publishing Co., Amsterdam, p. 121.
Widing, K. G. and Sandlin, G. D.: 1968, *Astrophys. J.* **152**, 545.
Wiese, W. L., Smith, M. W., and Glennon, B. M.: 1966, *Atomic Transition Probabilities*, Vol. I, U.S. Government Printing Office, Washington, D.C.

ARTICLE 2

Ceci est un tiré à part d'un article paru dans "The Astrophysical Journal" (1973) 181, 1009. Dans ce travail est donné le résultat de l'analyse du spectre solaire obtenu par L. HEROUX entre 50 Å et 300 Å. La précision estimée à environ 25% sur les intensités des raies a permis de vérifier les identifications déjà connues,d' éliminer de façon certaine des identifications restées douteuses ,et de proposer de nouvelles identifications. La méthode de Pottasch a été appliquée pour déterminer les abondances relatives de O, Ne, Mg, Si, Fe, Ni.

THE ASTROPHYSICAL JOURNAL, 181:1009–1030, 1973 May 1
© 1973. The American Astronomical Society. All rights reserved. Printed in U.S.A.

AN ANALYSIS OF THE SOLAR EXTREME-ULTRAVIOLET SPECTRUM BETWEEN 50 AND 300 Å

MONIQUE MALINOVSKY
Laboratoire de Physique Stellaire et Planetaire, 91 Verrieres-le-Buisson, France
AND
L. HEROUX
Air Force Cambridge Research Laboratories, L. G. Hanscom Field, Bedford, Massachusetts
Received 1972 August 4; revised 1972 November 13

ABSTRACT

Photoelectric data on the solar spectrum between 50 and 300 Å obtained with a grazing-incidence rocket spectrometer flown on 1969 April 4 are given. The spectrometer viewed the entire solar disk. The spectrometer was calibrated photometrically over the complete wavelength range with an estimated accuracy of ±25 percent. The intensities of the spectral lines were analyzed in detail to verify previous identifications of solar lines and to suggest new identifications. The method of Pottasch was also applied to determine the relative abundances of the elements O, Ne, Mg, Si, S, Fe, and Ni present in the Sun.

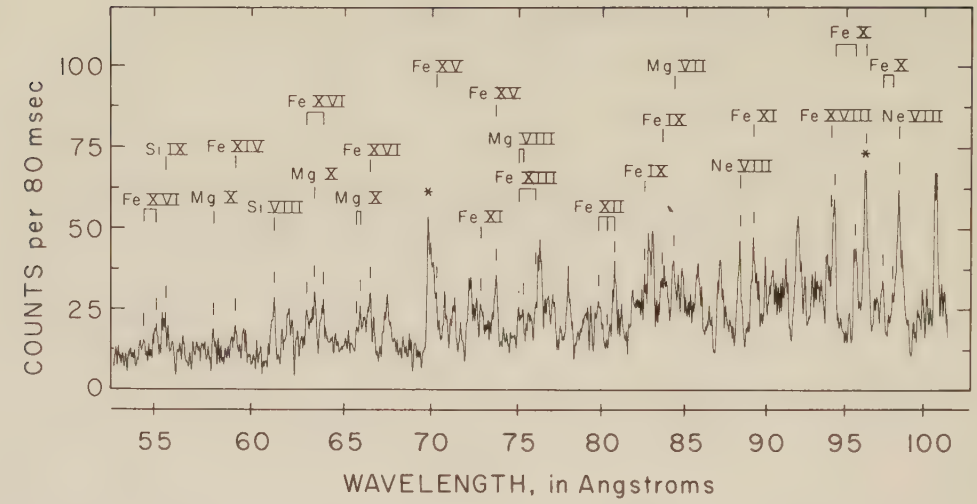
Subject headings: abundances, solar — line identifications — spectra, solar — spectra, ultraviolet

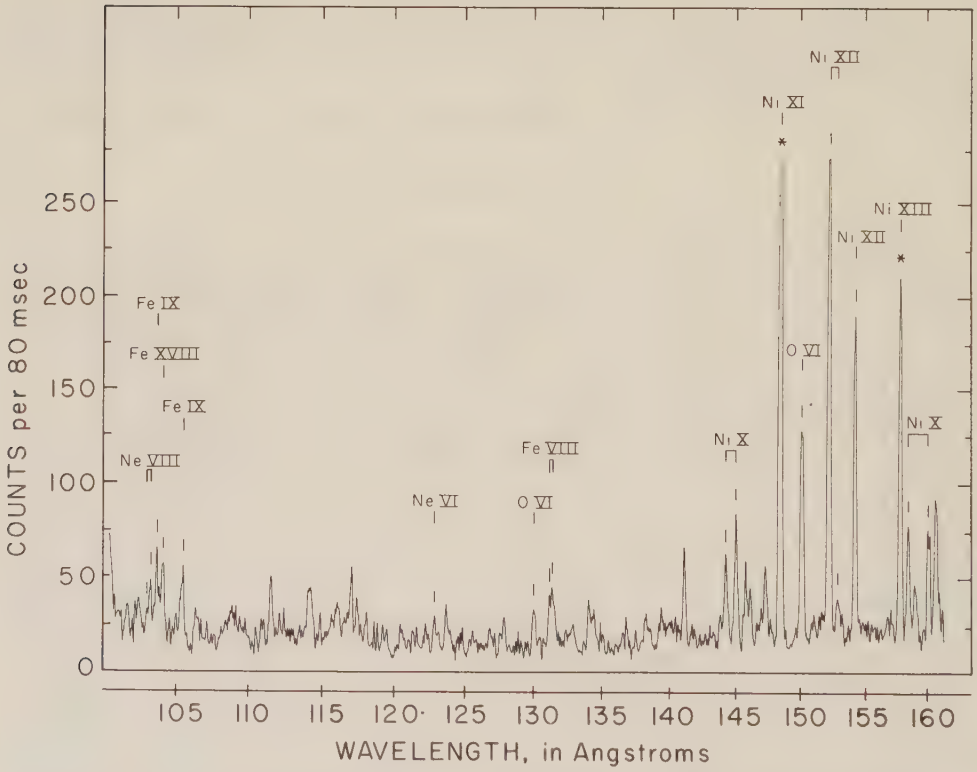
I. INTRODUCTION

The analysis of a photoelectric recording of the solar spectrum for the wavelength range 50–300 Å is the subject of this paper. The spectrum was recorded with a double spectrometer flown in an Aerobee rocket equipped with a biaxial solar pointing control from White Sands Missile Range, New Mexico, on 1969 April 4 at 1935 UT during a period of some solar activity. No solar flares occurred during the rocket flight. The spectrum was obtained from radiation emitted from the entire solar disk.

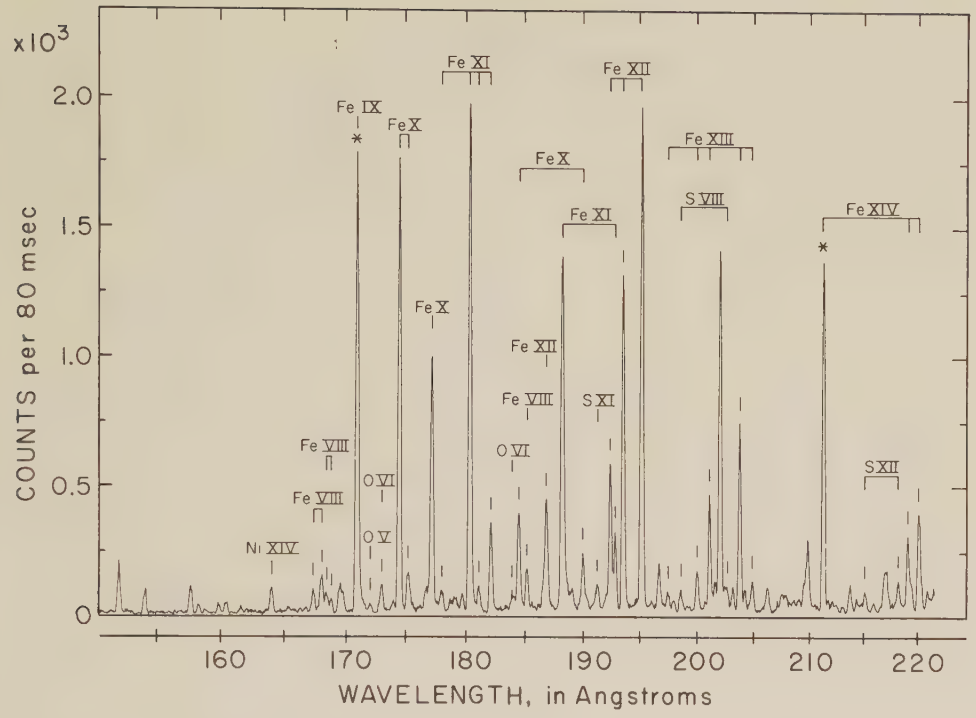
The double spectrometer consisted of two grazing-incidence spectrometers (two decks) in a single casting. Each deck was equipped with a 2-meter grating and four exit slits and channel electron photomultipliers for simultaneous recording of different wavelength regions. The 50–300 Å region of the solar spectrum was recorded by scanning the four exit slits and detectors along adjacent and slightly overlapping regions of the Rowland circle of one deck of the double spectrometer. The raw photoelectric data for this wavelength region and the identifications of some of the more intense solar emission lines are given in figure 1. For these data, the photomultiplier counts were accumulated for a time interval of 80 ms at each position of the exit slit along the circle. Table 1 gives a summary of the absolute intensities of the lines and their identifications. Some data for the limited longer wavelength regions 596–653 Å, 750–795 Å, and 1003–1050 Å, recorded on the other deck of the spectrometer, are also given in table 1. The spectral scans for these long-wavelength channels have been published by Heroux, Cohen, and Malinovsky (1972). In that paper, a detailed description of the double spectrometer and the method of calibration are also given.

Several instrumental parameters for the 50–300 Å deck of the spectrometer are relevant to the present analysis. The full width at half-intensity maximum (FWHM)





FIGS. 1*a*, *b*, *c*, *d*.—The spectrum between 55 and 300 Å of the entire solar disk obtained at 1935 UT on 1969 April 4. The asterisks indicate the reference lines used to obtain the wavelength scales. The folding of the data for the Fe XV line near 284 Å is introduced by the pulse-counting circuitry.


x10^3
2.0
1.5
1.0
0.5
0
COUNTS per 80 msec
Fe IX
Fe X
Fe XI
Fe XII
Fe XIII
S VIII
Fe XIV
Fe X
Fe XI
Fe X
Fe XII
Fe VIII
S XI
O VI
Fe VIII
O VI
Fe VIII
O V
Ni XIV
S XII
160
170
180
190
200
210
220
WAVELENGTH, in Angstroms

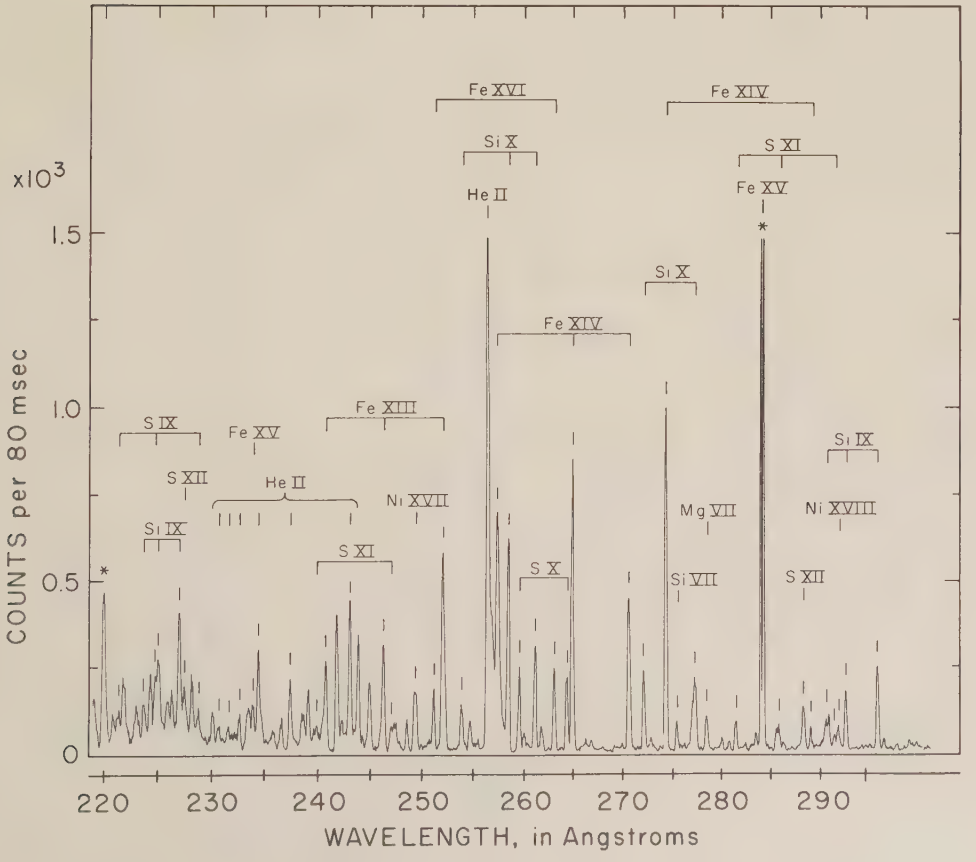

x10^3
1.5
1.0
0.5
0
COUNTS per 80 msec
Fe XVI
Si X
He II
Fe XIV
Fe XIV
S XI
Fe XV
Si X
Fe XIV
Fe XIII
S IX
Fe XV
Si IX
S XII
He II
Ni XVII
Mg VII
Ni XVIII
Si IX
S XI
S X
Si VII
S XII
220
230
240
250
260
270
280
290
WAVELENGTH, in Angstroms

TABLE 1

SUMMARY OF SOLAR EUV DATA

Ion	Solar λ(Å)	Predicted λ(Å)	Transition	J_ℓ	J_u	Ref.	Flux 10^{-3} ergs $cm^{-2}s^{-1}$	f	Ref.	log $A_E \int n_e^2$ dh
HeII	256.37[b]	256.317	$1s\ ^2S - 3p\ ^2P$	1/2	3/2	1	40 *	0.079	2	
	243.03	243.027	$1s\ ^2S - 4p\ ^2P$	1/2	3/2	1	9.0	0.029	2	
	237.36	237.331	$1s\ ^2S - 5p\ ^2P$	1/2	3/2	1	3.7	0.014	2	
	234.38[b]	234.347	$1s\ ^2S - 6p\ ^2P$	1/2	3/2	1	7.0*	0.0078	2	
	232.60	232.584	$1s\ ^2S - 7p\ ^2P$	1/2	3/2	1	1.6	0.0048	2	
	231.55	231.454	$1s\ ^2S - 8p\ ^2P$	1/2	3/2	1	1.1	0.0032	2	
	230.65	230.686	$1s\ ^2S - 9p\ ^2P$	1/2	3/2	1	0.9	0.0022	2	
OIV	790.15	790.20	$2s^2\ 2p\ ^2P - 2s\ 2p^2\ ^2D$	3/2	5/2	2	9.0	0.13	2	22.11
		790.10		3/2	3/2			0.014		
	787.50	787.71		1/2	3/2		4.7	0.15		22.11
OV	629.70	629.73	$2s^2\ ^1S - 2s\ 2p\ ^1P$	0	1	2	40.0	0.48	14	22.09
	172.12	172.17	$2s^2\ ^1S - 2s\ 3p\ ^1P$	0	1	2	1.1	0.37	14	22.28
	762.00	762.00	$2s\ 2p\ ^3P - 2p^2\ ^3P$ ‡	2	1	2	0.4	0.045	2	
	760.30	761.13		1	0			0.06		
		760.44		2	2		1.8	0.14		
		760.23		1	1			0.045		
	759.40	759.44		0	1		0.4	0.18		
	758.70	758.67		1	2		0.4	0.075		
OVI	1037.65	1037.63	$2s\ ^2S - 2p\ ^2P$ +	1/2	1/2	2	24.4 *	0.0648	2	
	1031.95	1031.95		1/2	3/2		52.3 *	0.131		
	150.10[b]	150.12	$2s\ ^2S - 3p\ ^2P$ +	1/2	1/2	2	2.5 *	0.087	2	
		150.08		1/2	3/2			0.175		
	184.10[b]	184.11	$2p\ ^2P - 3s\ ^2S$ ‡	3/2	1/2	2	1.3	0.0287	2	
	183.91[b]	183.93		1/2	1/2		0.7	0.0287		
	173.10[b]	173.08	$2p\ ^2P - 3d\ ^2D$ ‡	3/2	5/2	2	3.0	0.597	2	
		173.09		3/2	3/2			0.066		
	172.92[b]	172.93		1/2	3/2		1.4	0.661		
	129.87	129.87	$2p\ ^2P - 4d\ ^2D$ ‡	3/2	5/2	2		0.108	2	
		129.87		3/2	3/2		0.7	0.012		
		129.78		1/2	3/2			0.121		
NeVI	122.70	122.69	$2p\ ^2P - 3d\ ^2D$	3/2	5/2	2	0.6	0.78	2	22.07
				3/2	3/2			0.054		
	inv	122.49		1/2	3/2			0.53		
NeVII	97.58[b]	97.502	$2s^2\ ^1S - 2s\ 3p\ ^1P$	0	1	3	0.7	0.45	14	22.15
NeVIII	780.30	780.324	$2s\ ^2S - 2p\ ^2P$ +	1/2	1/2	2	4.5	0.0502	2	22.31
	770.50	770.402		1/2	3/2		7.7	0.102		22.23

TABLE 1—Continued

Ion	Solar λ(Å)	Predicted λ(Å)	Transition	J_ℓ	J_u	Ref.	Flux 10^{-3} ergs $cm^{-2}s^{-1}$	f	Ref.	log $A_E \int n_e^2$ dh
Ne VIII Cont.	88.13[b]	88.122	$2s\ ^2S - 3p\ ^2P^+$	1/2	1/2	3	2.6 *	0.298	2	
		88.092		1/2	3/2					
	103.14[b]	103.085	$2p\ ^2P - 3s\ ^2S\ ‡^+$	3/2	1/2	3	1.4	0.025	2	
	102.88[b]	102.911		1/2	1/2		0.7			
	98.26[b]	98.260	$2p\ ^2P - 3d\ ^2D\ ‡^+$	3/2	5/2	3	3.2	0.667	2	
	98.00[b]	98.115		1/2	3/2		1.0			
MgVII	278.40	278.40	$2s^2\ 2p^2\ ^3P - 2s\ 2p^3\ ^3S^+$	2	1	4	2.4	0.12	20	21.97
	277.00[b]	277.01		1	1		3.2 *	0.12		
	276.15	276.14		0	1		0.4	0.12		21.90
	84.05	84.08	$2s^2\ 2p^2\ ^3P - 2s^2\ 2p\ 3d\ ^3D$	2	2	1	2.5	0.116	15	22.39
		84.02		2	3			0.65		
		83.96		1	2			0.58		
		83.91		0	1			0.76		
MgVIII	75.09[b]	75.03	$2s^2\ 2p\ ^2P - 2s^2\ 3d\ ^2D$	3/2	5/2	2	2.2	0.55	20	22.56
		75.04		3/2	3/2			0.061		
	74.85[b]	74.86		1/2	3/2		1.5	0.61		22.55
MgIX	62.75[b]	62.75	$2s^2\ ^1S - 2s\ 3p\ ^1P$	0	1	2	2.6	0.51	14	22.65
MgX	624.80	624.93	$2s\ ^2S - 2p\ ^2P$	1/2	1/2	4	9.0	0.041	20	22.82
	609.80	609.76		1/2	3/2		19.5	0.084		22.84
	57.86	57.92	$2s\ ^2S - 3p\ ^2P^+$	1/2	1/2	2	4.0	0.107	20	23.11
		57.87		1/2	3/2			0.213		
	65.60	65.67	$2p\ ^2P - 3s\ ^2S\ ‡^+$	1/2	1/2	2	1.4	0.022	20	
	65.83	65.84		3/2	1/2		2.8	0.022		
	63.34[b]	63.29	$2p\ ^2P - 3d\ ^2D\ ‡^+$	3/2	5/2	2	5.0	0.603	20	
		63.31		3/2	3/2			0.067		
	63.12[b]	63.15		1/2	3/2		2.0	0.671		
SiVI	m	249.12	$2s^2\ 2p^5\ ^2P - 2s\ 2p^6\ ^2S$	1/2	1/2	4		0.11	20	
	245.94[b]	246.00		3/2	1/2		1.2	0.11		21.73
SiVII	275.35	275.35	$2s^2\ 2p^4\ ^3P - 2s\ 2p^5\ ^3P$	2	2	4	2.0	0.14	20	21.80
	m	278.44		1	2			0.076		
	276.77[b]	276.84		0	1		0.5	0.19		21.85
	275.76	275.66		1	1		0.3	0.044		21.85
	m	274.17		1	0			0.063		
	272.70	272.62		2	1		0.7	0.047		21.90
SiVIII	61.10[b]	61.07	$2p^3\ ^4S - 2p^2\ 3d\ ^4P$	3/2	5/2	1	8.4	1.4	15	22.77
		61.02		3/2	3/2					
		60.99		3/2	1/2					

TABLE 1—Continued

Ion	Solar λ(Å)	Predicted λ(Å)	Transition	J_ℓ	J_u	Ref.	Flux 10^{-3} ergs $cm^{-2}s^{-1}$	f	Ref.	log $A_E \int n_e^2$ dh
SiVIII cont.	216.9	216.92	$2s^2\ 2p^3\ ^2D$ - $2s\ 2p^4\ ^2P^{+\ddagger}$	5/2	3/2	2	3.0			
		216.79		3/2	3/2					
	214.75	214.75		3/2	1/2		0.7			
	235.55	235.56	$2s^2\ 2p^3\ ^2P$ - $2s\ 2p^4\ ^2P^{+\ddagger}$	3/2	3/2	2	0.5			
	inv	235.24		1/2	3/2					
	inv	233.16		3/2	1/2					
	inv	232.85		1/2	1/2					
SiIX	296.17	296.09	$2s^2\ 2p^2\ ^3P$ - $2s\ 2p^3\ ^3P$	2	2	4	6.3	0.068	20	22.55
		296.19		2	1	2		0.023		
	292.83	292.83		1	2	2		0.038		
		292.78		1	1	4	4.3	0.023		22.51
		292.83		1	0	2		0.030		
	290.72	290.69		0	1	4	2.1	0.092		22.52
	227.01	227.007	$2s^2\ 2p^2\ ^3P$ - $2s\ 2p^3\ ^3S$	2	1	4	7.9	0.099	20	22.57
	225.12[b]	225.033		1	1		4.5	0.099		22.56
	223.72	223.75		0	1		2.4	0.10		22.76
	55.30[b]	55.3	$2s^2\ 2p^2\ ^3P$ - $2s^2\ 2p\ 3d\ ^3D$			5	5.8	0.78	15	22.80
SiX	277.27[b]	277.23	$2s^2\ 2p\ ^2P$ - $2s\ 2p^2\ ^2S^+$	3/2	1/2	4	4.7	0.013	16	23.11
	271.99	271.98		1/2	1/2		5.5	0.043		22.96
	261.08	261.05	$2s^2\ 2p\ ^2P$ - $2s\ 2p^2\ ^2P^+$	3/2	1/2	4	6.8	0.029	20	22.70
	258.40	258.36		3/2	3/2		13.5	0.15		22.70
	256.37[b]	256.38		1/2	1/2		40.0*	0.12		
	253.80	253.78		1/2	3/2		2.5	0.06		22.66
SVIII	198.53[b]	198.550	$2s^2\ 2p^5\ ^2P$ - $2s\ 2p^6\ ^2S$	3/2	1/2	4	2.3	0.095	17	22.05
	202.64[b]	202.605		1/2	1/2		2.0	0.10		22.27
SIX	228.79[b]	228.84	$2s^2\ 2p^4\ ^3P$ - $2s\ 2p^5\ ^3P$	1	2	4	1.6	0.063	17	22.34
	m	226.59		0	1			0.154		
	m	225.23		1	1			0.038		
	224.81[b]	224.75		2	2		3.3	0.116		22.16
	223.26[b]	223.27		1	0		0.9	0.051		22.34
	221.26[b]	221.26		2	1		1.3	0.038		22.345
SX	264.27	264.24	$2s^2\ 2p^3\ ^4S$ - $2s\ 2p^4\ ^4P$	3/2	5/2	4	4.9	0.092	17	22.14
	259.50	259.52		3/2	3/2		5.2	0.062		22.34
	m	257.16		3/2	1/2			0.031		
SXI	291.63	291.59	$2s^2\ sp^2\ ^3P$ - $2s\ 2p^3\ ^3D$	2	3	4	0.85	0.07	17	22.33
	285.85[b]	285.83		1	2		1.6	0.056		22.36
	281.41	281.40		0	1		2.3	0.076		22.56

TABLE 1—Continued

Ion	Solar λ(Å)	Predicted λ(Å)	Transition	J_ℓ	J_u	Ref.	Flux 10^{-3} ergs $cm^{-2}s^{-1}$	f	Ref.	log $A_E \int n_e^2\, dh$
SXI cont.	m	291.83		2	2			0.017		
	295.57[b]	285.58		1	1		1.4	0.024		22.38
	246.91[b]	246.90	$2s^2\ 2p^2\ ^3P - 2s\ 2p^3\ ^3P$	2	2	4	1.5	0.036	17	22.47
	m	242.83		1	0			0.020		
				1	1			0.010		
	inv	242.57		1	2			0.036		
	239.87	239.81		0	1		1.4	0.071		22.53
	247.18[b]	247.16		2	1		1.6	0.0168		22.52
	191.29	191.26	$2s^2\ 2p^2\ ^3P - 2s\ 2p^3\ ^3S$	2	1	4	2.3	0.10	17	22.09
	188.70[b]	188.67		1	1		1.6	0.11		22.12
	inv	186.83		0	1			0.11		
SXII	299.50	299.52	$2s^2\ 2p\ ^2P - 2s\ 2p^2\ ^2D$	3/2	5/2	4	0.65	0.055	17	22.31
	288.36[b]	288.27		1/2	3/2		2.4	0.060		22.30
	227.47	227.51	$2s^2\ 2p\ ^2P - 2s\ 2p^2\ ^2S$	1/2	1/2	4	2.6	0.047	17	22.51
	m	234.48		3/2	1/2			0.0097		
	218.21	218.22	$2s^2\ 2p\ ^2P - 2s\ 2p^2\ ^2P$	3/2	3/2	4	2.4	0.157	17	22.08
	221.51	221.49		3/2	1/2		1.8	0.042		22.19
	215.16	215.14		1/2	1/2		2.0	0.10		22.17
	212.15	212.10		1/2	3/2		1.1	0.07		22.39
SXIII	256.69[b]	256.64	$2s^2\ ^1S - 2s\ 2p\ ^1P$	0	1	4	8.8	0.25	18	21.70
FeVIII	186.60[b]	186.57	$3p^6\ 3d\ ^2D - 3p^5\ 3d^2\ ^2F$	3/2	5/2	6	2.7	0.522	6	21.86
	inv	187.23		5/2	5/2			0.025		
	185.21	185.19		5/2	7/2		4.7	0.501		21.95
	168.92	168.93	$3p^6\ 3d\ ^2D - 3p^5\ 3d^2\ ^2P$	3/2	1/2	6	1.6	0.467	6	21.79
	168.55	168.56		5/2	3/2		2.6	0.563		21.75
	inv	168.02		3/2	3/2			0.095		
	168.17	168.18	$3p^6\ 3d\ ^2D - 3p^5\ 3d^2\ ^2D$	5/2	5/2	6	4.6	0.678	6	21.92
	inv	168.02		5/2	3/2			0.048		
	inv	167.66		3/2	5/2			0.073		
	167.50	167.50		3/2	3/2		2.5	0.657		21.84
	131.21[b]	131.24	$3p^6\ 3d\ ^2D - 3p^6\ 4f\ ^2F$	5/2	7/2	6	0.57	0.413	6	21.75
	inv	131.26		5/2	5/2			0.020		
	131.02[b]	130.94		3/2	5/2		0.63	0.434		21.93
FeIX	171.06	171.06	$3p^6\ ^1S - 3p^5\ 3d\ ^1P$	0	1	7	51.5	3.72	7	21.86
	105.27[b]	105.24	$3p^6\ ^1S - 3p^5(^2P_{3/2})4s[3/2]$	0	1	7	1.0	0.148	7	22.14
	103.53	103.58	$3p^6\ ^1S - 3p^5(^2P_{1/2})4s[1/2]$	0	1	7	2.3	0.229	7	22.32
	83.36[b]	83.45	$3p^6\ ^1S - 3p^5(^2P_{3/2})4d[3/2]$	0	1	7	2.1	0.469	7	22.22
	82.33	82.44	$3p^6\ ^1S - 3p^5(^2P_{1/2})4d[3/2]$	0	1	7	1.6	0.241	7	22.39

TABLE 1—Continued

Ion	Solar λ(Å)	Predicted λ(Å)	Transition	J_ℓ	J_u	Ref.	Flux 10^{-3} ergs $cm^{-2}s^{-1}$	f	Ref.	log $A_E \int n_e^2$ dh
FeX	184.52	184.53	$3p^5\ ^2P - 3p^4\ 3d\ ^2S$ +	3/2	1/2	7	11.0*	0.173	7	
	190.00	190.02		1/2	1/2		5.5*	0.130		
	177.22	177.24	$3p^5\ ^2P - 3p^4\ 3d'\ ^2P$	3/2	3/2	7	29.0	0.802	7	22.33
	182.39[b]	182.31		1/2	3/2		1.0	0.064		22.28
	m	180.45		1/2	1/2			0.575		
	175.47[b]	175.48		3/2	1/2		1.3	0.125		22.23
	174.53	174.58	$3p^5\ ^2P - 3p^4\ 3d''\ ^2D$	3/2	5/2	7	52.7	1.62	7	22.30
	175.24[b]	175.26		1/2	3/2		4.5	2.01		22.27
	inv	170.58		3/2	3/2			0.067		
	94.08[b]	94.01	$3p^5\ ^2P - 3p^4\ 4s\ ^2D$ +	3/2	5/2	21	3.2*	0.093	7	
	95.44[b]	95.37		1/2	3/2		2.5*	0.145		
	96.12[b]	96.12	$3p^5\ ^2P - 3p^4\ 4s\ ^2P$ +	3/2	3/2	21	3.2*	0.118	7	
	97.20	97.12	$3p^5\ ^2P - 3p^4\ 4s\ ^4P$	3/2	3/2	7	1.4	0.05	7	
	97.80[b]	97.83		3/2	5/2		0.4	0.003		
FeXI	188.23[b]	188.29	$3p^4\ ^3P - 3p^3\ 3d''\ ^3P$ +	2	2	7	39.8*	0.15	7	
	192.80	192.87		1	2		7.8*	0.053		
	180.40	180.42	$3p^4\ ^3P - 3p^3\ 3d''\ ^3D$ +	2	3	7	59.0	1.15	7	22.54
	182.16	182.17		1	2		10.3	0.92		22.50
	181.14	181.13		0	1		2.7	1.39		22.50
	180.71[b]	180.54		1	1		2.0	0.35		22.50
	178.02[b]	178.04		2	2		2.0	0.19		22.24
	inv	176.50		2	1			0.01		
	89.21[b]	89.19	$3p^4\ ^3P - 3p^3\ 4s\ ^3S$	2	1	5	1.0	0.091	7	22.72
	inv	90.20		1	1			0.091		
	inv	90.34		0	1			0.091		
	86.92[b]	86.77	$3p^4\ ^3P - 3p^3\ 4s\ ^3D$ +	2	3	7	2.2*	0.086	7	
	inv	88.17		0	1			0.059		
	88.00[b]	88.03		1	1		1.0*	0.030		
		87.99		1	2			0.044		
	87.12[b]	87.06		2	1		0.9*	0.008		
		87.03		2	2			0.04		
	72.60	72.7	$3p^4\ ^3P - 3p^3\ 4d\ ^3D$	2	3	7	2.5	0.181	7	22.63
	inv	73.2		1	2			0.105		
	184.76[b]	184.78	$3p^4\ ^1D - 3p^3\ 3d''\ ^1D$ ‡	2	2	7	1.0	0.538	7	
	179.74	179.75	$3p^4\ ^1D - 3p^3\ 3d''\ ^1F$ ‡	2	3	7	2.0	1.31	7	
	88.97[b]	89.10	$3p^4\ ^1D - 3p^3\ 4s\ ^1D$ ‡	2	2	5	2.5	0.157	7	
FeXII	195.14	195.14	$3p^3\ ^4S - 3p^2\ 3d\ ^4P$	3/2	5/2	7	48.8	0.592	7	22.73
	193.50	193.53		3/2	3/2		33.1	0.417		22.71
	192.38	192.42		3/2	1/2		15.6	0.218		22.67

TABLE 1—Continued

Ion	Solar λ(Å)	Predicted λ(Å)	Transition	J_ℓ	J_u	Ref.	Flux 10^{-3} ergs $cm^{-2}s^{-1}$	f	Ref.	log $A_E \int n_e^2\, dh$
FeXII cont.	79.58[b]	79.49	$3p^3\ ^4S - 3p^2\ 4s\ ^4P$	3/2	5/2	8	2.1	0.095	7	22.78
	80.06[b]	80.02		3/2	3/2		1.2	0.063		22.71
	80.56[b]	80.50[b]		3/2	1/2		4.0*	0.031		
	186.87[b]	186.87	$3p^3\ ^2D - 3p^2\ 3d'\ ^2F$ ‡	5/2	7/2	7	9.8			
FeXIII	251.96	251.97	$3s^2\ 3p^2\ ^3P - 3s\ 3p^3\ ^3S$	2	1	9	11.8	0.198	10	22.71
	246.24[b]	246.23		1	1		7.1	0.180		22.76
	240.73	240.73		0	1		5.5*	0.16		
	203.78	203.81	$3p^2\ ^3P - 3p\ 3d\ ^3D$	2	3	10	14.5	0.688	10	22.84
				2	2			0.244		
	204.89	204.92		2	1		2.9	0.062		22.72
	201.10	201.12		1	1		11	0.30		22.83
	200.0	200.01		1	2		3.7	0.26		22.84
	197.41	197.43		0	1		1.8	0.15		22.83
	75.86[b]	75.89	$3p^2\ ^3P - 3p\ 4s\ ^3P$	2	1	8	1.5*	0.034	7	
	74.85[b]	74.84		2	2		1.5*	0.088		
	196.63	196.65	$3p^2\ ^1D - 3p\ 3d\ ^1F$ ‡	2	3	7	4.5			
FeXIV	274.24	274.22	$3s^2\ 3p\ ^2P - 3s\ 3p^2\ ^2S$	1/2	1/2	9	21.8	0.215	16	22.96
	289.17	289.17		3/2	1/2		1.3	0.0047		23.10
	270.50	270.51	$3s^2\ 3p\ ^2P - 3s\ 3p^2\ ^2P$	3/2	1/2	9	10.4	0.127	16	22.92
	264.80	264.79		3/2	3/2		18	0.40		22.90
	257.48[b]	257.40		1/2	1/2			0.16		
	252.17[b]	252.20		1/2	3/2		4.7	0.18		22.97
	220.08	220.09	$3s^2\ 3p\ ^2P - 3s^2\ 3d\ ^2D$	3/2	3/2	7	10.15	0.072	16	22.92
	219.09	219.11		3/2	5/2		6.8	0.50		22.91
	211.32	211.34		1/2	3/2		36.6	0.55		22.89
	59.01	58.96	$3s^2\ 3p\ ^2P - 3s^2\ 4d\ ^2D$	1/2	3/2	7	3.5	0.276	7	23.02
	inv	59.62		3/2	3/2			0.027		
		59.58		3/2	5/2			0.245		
FeXV	284.15	284.15	$3s^2\ ^1S - 3s\ 3p\ ^1P$	0	1	11	64.8	0.96	19	22.97
	52.80	52.91	$3s^2\ ^1S - 3s\ 4p\ ^1P$	0	1	5	5.5	0.45	19	23.10
	233.84	233.87	$3s\ 3p\ ^3P - 3s\ 3d\ ^3D$ ‡	2	3	11	3.6			
	inv	227.70		1	1					
	inv	227.21		1	2					
	inv	224.76		0	1					
	70.05[b]	70.05	$3s\ 3d\ ^3D - 3s\ 4f\ ^3F$ ‡	3	4	12	1.6			
	73.52	73.47	$3s\ 3d\ ^1D - 3s\ 4f\ ^1F$ ‡	2	3	8	3.2			
FeXVI	262.99	262.98	$3p\ ^2P - 3d\ ^2D$ ‡	3/2	5/2	11	5.5			
	251.10	251.06		1/2	3/2		3.8			

TABLE 1—Continued

Ion	Solar λ(Å)	Predicted λ(Å)	Transition	J_ℓ	J_u	Ref.	Flux 10^{-3} ergs $cm^{-2}s^{-1}$	f	Ref.	log $A_E \int n_e^2$ dh
FeXVI cont.	m	265.00		3/2	3/2					
	66.35[b]	66.37	$3d\ ^2D - 4f\ ^2F$ ‡	5/2	7/2	5	4.0			
	66.24[b]	66.26		3/2	5/2		5.0			
	63.80[b]	63.72	$3p\ ^2P - 4s\ ^2S$ ‡	3/2	1/2	12	4.5			
	62.89[b]	62.88		1/2	1/2		3.7			
	54.80[b]	54.73	$3p\ ^2P - 4d\ ^2D$ ‡	3/2	1/2	5	6.0			
	54.20[b]	54.14		1/2	3/2		3.0			
FeXVIII	103.95[b]	103.96	$2s^2\ 2p^5\ ^2P - 2s\ 2p^6\ ^2S$ +	1/2	1/2	4	2.0*	0.06	18	
	93.93[b]	93.94		3/2	1/2		0.7	0.06		22.12
NiX	159.94	159.97	$3p^6\ 3d\ ^2D - 3p^5\ 3d^2\ ^2F$	3/2	5/2	13	1.2	0.793	15	21.12
	158.38	158.37		5/2	7/2		1.3	0.756		21.06
	145.00	144.99	$3p^6\ 3d\ ^2D - 3p^5\ 3d^2\ ^2D$	5/2	5/2	13	1.6	0.883	15	21.14
	inv	144.88		5/2	3/2			0.063		
	144.21	144.33		3/2	5/2		0.13	0.095		21.17
		144.22		3/2	3/2			0.856		
NiXI	148.38	148.37	$3p^6\ ^1S - 3p^5\ 3d\ ^1P$	0	1	7	9.7	3.25	7	21.35
NiXII	154.20	154.15	$3p^5\ ^2P - 3p^4\ 3d'\ ^2P$	3/2	3/2	7	3.8	0.715	7	21.68
	152.84[b]	152.95	$3p^5\ ^2P - 3p^4\ 3d''\ ^2D$	1/2	3/2	7	0.43	1.78	7	21.57
	152.15	152.14		3/2	5/2		6.6	1.42		21.62
NiXIII	157.73	157.75	$3p^4\ ^3P - 3p^3\ 3d''\ ^3D$	2	3	7	3.8	1.01	7	21.57
NiXIV	164.13	164.13	$3p^3\ ^2D - 3p^2\ 3d\ ^2F$	5/2	7/2	7	2.9			
NiXVII	249.23[b]	249.17	$3s^2\ ^1S - 3s\ 3p\ ^1P$	0	1	10	3.2	0.82	15	21.62
NiXVIII	292.00	291.98	$3s^2\ ^2S - 3p\ ^2P$	1/2	3/2	10	1.4	0.25	15	21.47

FOOTNOTES TO TABLE 1

b, denotes blend. Wavelength and intensity obtained by deconvolution (§ II*a*).

* The experimental intensity is appreciably higher than the calculated intensity.

† See discussion of line in § III.

‡ Transition is not to the ground term.

m, denotes that the calculated line intensity is sufficient for observation, but the line is masked.

inv, denotes that the calculated line intensity indicates that the line should be invisible.

REFERENCES.—(1) Kelly 1968; (2) Wiese, Smith, and Glennon 1966; (3) Tondello and Paget 1970; (4) Fawcett 1971; (5) Widing and Sandlin 1968; (6) Czyzak and Krueger 1966; (7) Fawcett, Peacock, and Cowan 1968; (8) Fawcett *et al.* 1972; (9) Fawcett 1970; (10) Widing, Sandlin, and Cowan 1971; (11) Fawcett, Gabriel, and Saunders 1967; (12) Fawcett *et al.* 1966; (13) Gabriel, Fawcett, and Jordan 1966; (14) Nussbaumer 1972; (15) Bates and Damgaard 1949; (16) Garstang 1962; (17) Kastner 1967; (18) Smith and Wiese 1971; (19) Jordan 1965; (20) Wiese, Smith, and Miles 1969; (21) Behring, Cohen, and Feldman 1972.

NOTE.—For Fe XV, the entry under the Flux column should read 115 instead of 64.8 and the entry in the last column should read 23.22 instead of 22.97.

of the triangular instrumental line shape was approximately 0.25 Å over the entire wavelength range. A wavelength scale was established for each of the four channels by using the grating equation and the positions of two solar lines of known wavelength which fell within the channel. The reference lines used are indicated with asterisks in figure 1. The accuracies of the wavelength measurements are estimated to be better than ±0.06 Å. The estimated accuracy of the photometric calibration of the spectrometer is ±15–20 percent. The estimated accuracy of the absolute intensities of the solar lines varies from about ±20 percent to ±50 percent depending upon the ratio of line intensity to background. The accuracy of the relative intensities of strong lines that are close in wavelength will be much better than 20 percent in general. The intensities of the lines between 50 and 300 Å were obtained from data acquired from one scan in wavelength over an altitude range of 230–247 km. No corrections for atmospheric absorption were applied to these data. Corrections for atmospheric absorption, however, were applied to obtain the intensities of the lines between 596 and 1050 Å (Heroux *et al.* 1972).

The solar spectrum between 50 and 300 Å has been recorded in several previous rocket experiments. Hinteregger, Hall, and Schweizer (1964) and Hall *et al.* (1965) obtained photoelectric recordings of the spectrum between 50 and 310 Å with a spectral resolution (FWHM) which varied from 0.25 to 0.75 Å at the two extremes of the wavelength scan. Their spectrometers were calibrated photometrically at the two wavelengths 304 and 256 Å and the calibration extrapolated to shorter wavelengths. Manson (1967, 1968) used a Geiger-Müller counter as a photon detector to measure the solar spectrum between 30 and 128 Å with a constant instrumental FWHM of 0.2 Å over the wavelength range. This spectrometer was calibrated photometrically over its entire wavelength range enabling the spectral line intensities to be determined to an estimated accuracy of ±25 percent. Freeman and Jones (1970) obtained photographic recordings of the solar spectrum between 15 and 90 Å and between 139 and 430 Å with a spectral resolution of 0.1 Å. They give the absolute intensities of the stronger emission lines with an estimated accuracy of no better than a factor of 2. Several other photographic recordings of the solar spectrum for various regions of wavelength between 50 and 400 Å have also been obtained with high spectral resolution but without a photometric calibration. These recordings have covered the solar spectrum between 33 and 110 Å with a spectral resolution between 0.1 and 0.3 Å (Austin *et al.* 1966, 1967), between 50 and 210 Å with a resolution of 0.05 Å (Schweizer and Schmidtke 1971), and between 60 and 385 Å with a resolution of 0.04 Å (Behring, Cohen, and Feldman 1972).

This paper gives the results of an analysis of the solar extreme-ultraviolet (EUV) spectrum in which the experimental intensities of the emission lines are compared with their predicted intensities calculated for the conditions of excitation assumed to be valid in the upper chromosphere and corona. This study was used to compile table 1 and to establish the spectral line identifications given in figure 1. The detailed analysis of the spectral line intensities proved to be particularly useful in verifying or rejecting previous identifications of the solar emission lines and also in establishing new solar line identifications suggested by recent laboratory data that give the classifications and wavelengths of emission lines of a variety of ion species of elements known to be abundant in the sun. With a few exceptions, as noted in table 1, the intensities of the spectral lines retained in the table which terminate on the ground-term levels of the ions satisfy three criteria. These criteria are the agreement between the calculated and experimental intensities of (1) the component lines of a given multiplet, (2) the lines of different multiplets of the same ion, and (3) the lines of multiplets of different ion species of the same element. Criterion (3) is established by comparing the values of the quantity $A_E \int_R n_e^2 dh$ for the spectral lines of different ion species of the same element,

where A_E is the abundance of the element relative to hydrogen, n_e is the electron density, and R is the region in the solar atmosphere from which the line is predominantly emitted. The evaluation of this quantity for the emission lines of a variety of ion species of the various elements also permits the determination of the relative abundances of the elements in the solar atmosphere. These abundance determinations are given in this paper.

II. METHODS USED TO ANALYZE THE SPECTRUM

a) The Wavelengths of the Spectral Lines

Previous analyses of the solar spectrum particularly by Jordan (1965), Widing and Sandlin (1968), Widing, Sandlin, and Cowan (1971), Freeman and Jones (1970), and Behring *et al.* (1972) were used as a basis for compiling table 1. The "solar wavelength" in column (2) of table 1 is an experimental measurement obtained from the spectrum of 1969 April 4. The "predicted wavelength" in column (3) is a laboratory measurement of the spectral line; the reference to the predicted wavelength and the line classification is given in column (7). The solar and predicted wavelengths of the lines retained in the table generally agree to within 0.13 Å corresponding to $\frac{1}{2}$ FWHM of the instrumental line shape. As indicated in the table, several of the lines in the solar spectrum are components of a blend of lines. For these blended lines, the wavelength and intensity of the lines were obtained by a deconvolution method developed by Vidal-Madjar (1971) which consists of a least-squares fit of the experimental data to a superposition of test triangles having a FWHM of 0.25 Å. The heights (intensities) and wavelength positions of the triangles were used as parameters to establish the best fit. With the exception of the solar line at 256.37 Å, discussed in §§ III*a* and III*e*(ii), the data given in table 1 refer to the components of the blend.

b) The Analysis of the Line Intensities

For the low electron densities in the upper chromosphere and corona, the populations of the excited levels of the ground term relative to the ground level can be significantly less than that given by a thermal distribution in which the levels are populated according to their statistical weights (Gabriel, Fawcett, and Jordan 1965). Therefore, the relative populations of the ground-term levels must be determined if one is to attempt to compare the experimental and calculated relative intensities of the components of a given multiplet in the solar spectrum for the purpose of verifying line identifications.

A method described by Jordan (1965, 1966) to determine the relative populations of the levels of the ground term of an ion was used in the present study of the solar spectrum. The flux $\Phi(b, j)$ in photons $\mathrm{cm}^{-3}\,\mathrm{s}^{-1}$ of a permitted line arising from a transition between an upper excited level j to a level b of the ground term of an ion can be calculated under the assumption that the line is produced only by electron excitation from the levels of the ground term followed by radiative decay to the level b. The flux of a spectral line of an ion having a three-level ground term consisting of the ground level g and two excited levels u_1 and u_2, for example, is given by

$$\Phi(b, j) = n_e n_g C' f_{b \to j} F\,, \tag{1}$$

where

$$F = \frac{\omega_b}{\omega_j} \frac{1}{\sum f_j} \left[f_{g \to j} + (n_{u_1}/n_g) f_{u_1 \to j} + (n_{u_2}/n_g) f_{u_2 \to j} \right].$$

In these equations n_g, n_{u_1}, and n_{u_2} are the population densities of the levels of the ground term, n_e is the electron density, the ω's are the statistical weights of the levels, and the f's are the oscillator strengths of the indicated transitions. The product $C'f_{b\to j}$ in equation (1) is the rate coefficient [$\mathrm{cm^3\ s^{-1}}$] for the transition which depends upon the electron temperature and atomic parameters. The factor C' may be taken to be the same for all components of a given multiplet. By using equation (1), we can obtain the values n_u/n_g for the levels of the ground term of an ion from the experimental relative intensities of the components of a particular multiplet and knowledge of the relative values of the oscillator strengths of the components of the multiplet. There are a limited number of multiplets available which can be used to determine n_u/n_g. However, once the value n_u/n_g for an ion has been established, the ratio can be used in equation (1) to calculate the relative intensities of the components of other multiplets which terminate on the ground term. The variation of n_u/n_g for several ions of a particular isoelectronic sequence can also be determined experimentally and these data used to construct a smooth curve of n_u/n_g for the entire sequence (Jordan 1965). A family of these curves for the different sequences permits the relative intensities of the components of multiplets that terminate on the ground term of ions present in the Sun to be calculated in general.

For those multiplets in table 1 which do not terminate on the ground term, the calculated relative intensities of the multiplet components have been assumed to be given by the relative strengths (gf-values) of the components.

To calculate the relative intensities of the spectral lines of different multiplets of the same ion, it is convenient to modify equation (1) according to the procedure given by Pottasch (1964). The absolute intensity of the spectral line $I(b, j)$ in $\mathrm{ergs\ cm^{-2}\ s^{-1}}$ measured at the top of the Earth's atmosphere then becomes

$$I(b,j) = 2.4 \times 10^{-20} f_{b\to j}\bar{g}[n_g/n(i)]FA_E \int_R \frac{\exp(-\Delta E_{gj}/kT)}{T^{1/2}} \frac{n(i)}{n(E)} n_e^2 dh\,, \qquad (2)$$

where the excitation rate coefficient for the transition $b \to j$ is expressed, according to Van Regemorter (1962), in terms of the oscillator strength, an effective Gaunt factor $\bar{g}$, and the excitation energy ΔE_{gj} of the transition. In equation (2), $n(i)$ is the density of the ion species and $n(E)$ the density of the element. The ratio $n(i)/n(E)$ is established by ionization balance and depends on electron temperature. The quantity $A_E = n(E)/n(\mathrm{H})$ is the abundance of the element relative to hydrogen and is assumed to be independent of temperature. The quantity $[n_g/n(i)]F$ introduced for the first time by Jordan (1966) takes account of the departure of the populations of the ground-term excited levels from a thermal distribution.

The Pottasch method for solving equation (2) assumes that the temperature-dependent quantity

$$G(T) = \frac{\exp(-\Delta E_{g,j}/kT)}{T^{1/2}} \frac{n(i)}{n(E)}$$

under the integral has a sharp maximum at the temperature $T_{\max}$ and that the spectral line is emitted predominantly in a narrow temperature range near $T_{\max}$. One can therefore determine an average constant value of $G(T)$ for the temperature interval in which the line is predominantly emitted. This average, defined as $\langle G\rangle = 0.7[G(T)]_{\max}$, can be determined for a given spectral line by using calculated values of the ionization equilibrium ratio $n(i)/n(E)$ of Jordan (1969). The quantity $\langle G\rangle$ can then be taken outside the integral, and equation (2) becomes

$$I(b,j) = 2.4 \times 10^{-20} f_{b\to j}\bar{g}[n_g/n(i)]F\langle G\rangle A_E \int_R n_e^2 dh\,. \qquad (3)$$

If it is assumed that the different spectral lines of the same ion species are emitted approximately in the same temperature region of the solar atmosphere, the quantity $A_E \int_R n_e^2 dh$ will be essentially the same for the different spectral lines. The calculated relative intensities of spectral lines of the same ion species will therefore be given by

$$\frac{I_1}{I_2} = \frac{f_1 \bar{g}_1 F_1 \langle G_1 \rangle}{f_2 \bar{g}_2 F_2 \langle G_2 \rangle} . \tag{4}$$

By using the experimental absolute intensity $I(b, j)$ of the spectral line together with the calculated values of the quantities f, $\bar{g}$, $[n_g/n(i)]F$, and $\langle G \rangle$, one can also evaluate, according to equation (3), the quantity $A_E \int_R n_e^2 dh$ for each spectral line that terminates on the ground-term level of the ion. This quantity is given in the last column in table 1. Because this quantity is expected to be approximately the same for each spectral line of a given ion, it provides a very convenient measure of the agreement between the calculated and experimental values of spectral line intensities for the various lines of a given ion species. In addition, the quantity $A_E \int_R n_e^2 dh$ is expected to vary smoothly for spectral lines of successive stages of ionization of the same element. It therefore also provides a test of the agreement between the calculated and experimental intensities of the spectral lines of different ion species of a given element.

In evaluating $A_E \int_R n_e^2 dh$, it is assumed that the transition probability of the multiplet terminating on the ground term is the main contribution to the total transition probability of the upper term of the multiplet. Cascading transitions into the upper term of the multiplet are also assumed to introduce a negligible contribution to the population of the upper term.

The oscillator strengths used in the above calculations are given in column (9), and their references in column (10). In the calculations, the values of Jordan (1969) for $n(i)/n(E)$ versus temperature were used to determine $\langle G \rangle$. The values of $\bar{g}$ were those calculated by Blaha (1969) for the transitions which do not involve a change in the principal quantum number n. Where Blaha does not give a value of $\bar{g}$ for this class of transitions ($\Delta n = 0$), a value of $\bar{g} = 0.6$ was adopted. For those transitions involving a change in the principal quantum number, the values of $\bar{g}$ given by Jordan (1965) were used.

III. DISCUSSION OF THE IDENTIFICATIONS

a) Helium

The quantity $A_E \int n_e^2 dh$ has not been evaluated for the spectral lines of He II because excitation processes in addition to those assumed for equation (3) are expected to be important. In particular, photoexcitation processes are expected to be important, since the spectral lines of He II are not optically thin.

The $1s$–$3p$ transition of He II is blended with the Si X $2s\,^2P_{1/2}$–$2p\,^2P_{1/2}$ line. The total intensity of the blend is given in the table. If one corrects the intensity of the solar line at 256.37 Å for the Si X line (see discussion for Si X), the estimated intensity of the $1s$–$3p$ transition of He II becomes 26×10^{-3} ergs cm^{-2} s^{-1}.

The intensities of the transitions $1s$–np of He II appear to decrease monotonically with increasing n as can be seen from table 1. One would therefore predict that the intensity of the $1s$–$6p$ transition of He II should be about 2×10^{-3} ergs cm^{-2} s^{-1}. The S XII $2s^2 2p\,^2P_{3/2}$–$2s 2p^2\,^2S_{1/2}$ line observed in the laboratory at a slightly longer wavelength (+0.14 Å) than the $1s$–$6p$ line of He II is expected to be present in the solar spectrum. However, because the estimated intensity of this line of S XII is only 1×10^{-3} ergs cm^{-2} s^{-1}, it cannot account for the anomalously high intensity of the $1s$–$6p$ transition of He II.

b) Oxygen

i) O IV

It has been suggested (Jordan 1965) that the pair of solar lines at 279.62 and 279.98 Å and another pair at 238.37 and 238.62 Å correspond respectively to the $2s^2 2p\ ^2P$–$2s^2 3s\ ^2S$ and the $2s^2 2p\ ^2P$–$2s^2 3d\ ^2D$ transitions in O IV. These lines are not included in table 1 because their intensities relative to the intensity of the resonance multiplet of O IV appear too high by a factor of 10 for the $2p$–$3s$ transition and a factor of 4 for the $2p$–$3d$ transition.

ii) O VI

The temperature dependence of the flux emitted by the spectral lines of the lithium-like ions O VI, Ne VIII, and Mg X present in the Sun has been studied by Heroux *et al.* (1972). That study indicated that for O VI, in particular, the different spectral lines of the same ion species are emitted from significantly different temperature regions in the solar atmosphere and that the lines are emitted over a much wider region of temperature than would be expected by evaluating the quantity $\langle G \rangle$ which is used in equation (3) in the present analysis. The method of analysis used here is therefore not suitable to determine the quantity $A_E \int n_e^2 dh$ for the $2s$–$2p$ and $2s$–$3p$ transitions in O VI.

c) Neon

The intensities given in table 1 for the $2s$–$3p$, $2p$–$3s$, and $2p$–$3d$ transitions in Ne VIII were obtained by deconvolution of the experimental line shapes of the solar emission lines.

This deconvolution technique indicates that the solar line near 88.1 Å consists of a blend of two lines, one at 88.13 Å attributed to the $2s$–$3p$ transition of Ne VIII and the other at 88.00 Å attributed to the $3p^4\ ^3P_1$–$3p^3 4s\ ^3D_{1,2}$ components of Fe XI (also given in table 1).

The sum of the intensities of the two components of the $2p$–$3s$ multiplet of Ne VIII is higher by a factor of about 2 than the intensity of this multiplet given previously by Heroux *et al.* (1972). The difference between the present and previous value of intensity is due almost entirely to the different background levels established by the deconvolution technique and that estimated in the previous analysis.

As mentioned by Heroux *et al.* (1972), the prominent feature in the solar spectrum near 98 Å is an obvious blend of lines. The deconvolution procedure has separated this feature into three lines. Two of the lines at 98.00 and 98.26 Å coincide in wavelength with the predicted wavelengths of the components of the $2p$–$3d$ transition in Ne VIII, while the third line at 98.55 Å is unidentified.

If the intensities of the three multiplets of the transitions $2s$–$3p$, $2p$–$3s$, and $2p$–$3d$ in Ne VIII are calculated according to the method described by Heroux *et al.* (1972) in which the electron excitation cross-sections of Bely (1966*a*, *b*) are used and in which the electron density and temperature gradient in the solar atmosphere are taken into account, the calculated intensities and the experimental intensities given in table 1 agree to within 10 percent. This agreement supports the identifications and intensities of the lines originating from the $3s$, $3p$, and $3d$ levels of Ne VIII. However, the agreement between the calculated and experimental values of the $2s$–$2p$ resonance transition of Ne VIII is not as good as that for the above lines, as can be seen in table 3 in § IV, which summarizes the intensity calculations for the lithium-like ions based upon the data given in the present paper.

d) *Magnesium*

i) Mg VII

The blend observed at 277 Å was separated into three lines, one of which coincides in wavelength with the $J = 1$–1 component of the transition $2s^2 2p^2\ ^3P$–$2s2p^3\ ^3S$ of Mg VII. The $J = 2$–1 component of this multiplet at 278.40 Å is a well isolated line. From the experimental intensity of this latter component, one can predict that the 1–1 component of the multiplet should be only 1.4×10^{-3} ergs cm^{-2} s^{-1}.

A solar line at 83.66 Å (not given in table 1) has been identified by Widing and Sandlin (1968) as the multiplet $2p^2\ ^3P$–$2p3d\ ^3P$ of Mg VII. The present analysis indicates that this line is too intense by a factor of about 6 to be attributed to this multiplet of Mg VII. This conclusion is based on the experimental intensity of the $2p^2\ ^3P$–$2p3d\ ^3D$ multiplet of Mg VII near 84.05 Å.

ii) Mg VIII

Both Jordan (1965) and Widing and Sandlin (1968) have suggested that a line near 82.80 Å corresponds to the component $2p\ ^2P_{3/2}$–$3s\ ^2S_{1/2}$ of Mg VIII. However, based on the intensity of the multiplet $2p\ ^2P$–$3d\ ^2D$ of Mg VIII at 75.09 Å and the relative oscillator strengths of the transitions $2p$–$3s$ and $2p$–$3d$ of Mg VIII, the spectral lines observed near 82.62 and 82.77 Å are too intense by a factor of about 20 to be associated with the $2p\ ^2P$–$3s\ ^2S$ multiplet of Mg VIII.

iii) Mg X

The small differences in the absolute intensities of the $2s$–$3p$, $2p$–$3s$, and $2p$–$3d$ transition in Mg X given in table 1 and those given previously (Heroux *et al.* 1972) originate from the different methods used to determine the background (see discussion for neon).

e) *Silicon*

i) Si VIII

There are three lines observed at 69.63, 69.80, and 69.93 Å which have been identified by Jordan (1965) and Behring *et al.* (1972) as the components of the $2p^3\ ^4S$–$2p^2 3s\ ^4P$ transition in Si VIII. The experimental intensities of these lines, however, appear to be more intense by a factor of 100 than the predicted intensities of the lines of the $2p$–$3s$ transition of Si VIII based upon the values of $A_E \int n_e^2 dh$ of the spectral lines of other ion species of silicon.

Because the transition $2s^2\ 2p^3\ ^2D$–$2s2p^4\ ^2P$ of Si VIII having components at 216.9 and 214.75 Å does not terminate on the ground term of the ion, the intensity cannot be compared with other multiplets of Si VIII. The identifications of the spectral lines of this multiplet given in table 1 are those given by Jordan (1965) and Behring *et al.* (1972). It should be pointed out that the relative intensity of the two components $J = \frac{3}{2}$–$\frac{1}{2}$ and $J = \frac{5}{2}$–$\frac{3}{2}$ do not agree with the predicted relative intensity of 0.5 given by the ratio of the gf-values of the components.

ii) Si X

The intensity of the solar line observed at 256.37 Å can be explained entirely by a blend of the $1s$–$3p$ transition of He II and the $2s^2 2p\ ^2P_{1/2}$–$2s2p^2\ ^2P_{1/2}$ line of Si X. The total intensity of the blend is given in table 1. The contribution of the Si X line deduced from the other components of the multiplet is 14×10^{-3} ergs cm^{-2} s^{-1}. The remainder of the intensity, 26×10^{-3} ergs cm^{-2} s^{-1}, attributed to the $1s$–$3p$

transition of He II appears to be in good agreement with the intensities of the other transitions in He II given in table 1.

The intensity ratio of the components of the multiplet $2s^2 2p\ ^2P$–$2s2p^2\ ^2S$ of Si X at 277.27 and 271.99 Å is in good agreement with the ratio calculated by using the *f*-values of Garstang (1962). The intensity of the multiplet, however, appears to be larger by a factor of 2 than the predicted intensity deduced from the intensity of the $2s^2 2p\ ^2P$–$2s2p^2\ ^2P$ multiplet of the same ion. The $2s^2 2p\ ^2P_{1/2}$–$2s2p^2\ ^2S_{1/2}$ component of Si X at 271.99 Å is clearly defined and well isolated in the solar spectrum so that the experimental intensity should be accurate to ± 25 percent. This same line apparently is also observed to be free of blending in the high-resolution spectra of Freeman and Jones (1970) and Behring *et al.* (1972).

f) *Sulfur*

The tables of wavelengths of the emission lines of sulfur due to the transitions $2s^2 2p^n$–$2s2p^{n+1}$ recently given by Fawcett (1971) were used to compile the identifications of S VIII through S XII. The only apparent disagreement between the present identifications and other recent identifications of sulfur lines (Freeman and Jones 1970; Behring *et al.* 1972) is that the line at 198.53 Å is identified as a transition to the ground level in S VIII rather than as a transition between excited levels of S IX.

g) *Iron*

i) Fe VIII

Widing and Sandlin (1968) have identified a broad line near 107.95 Å as the $3d\ ^2D$–$5f\ ^2F$ transition of Fe VIII. Our calculations based on the intensities of the other multiplets of Fe VIII given in table 1 indicate that this multiplet of Fe VIII should not be visible above background.

ii) Fe X

The two components of the ground term transition $3p^5\ ^2P$–$3p^4 3d\ ^2S$ of Fe X near 184.5 and 190.0 Å have the correct relative intensities and coincide in wavelength with their laboratory values. However, the intensities of these lines given in table 1 appear to be too high by a factor of about 3 in comparison to their expected values based on the intensities of the other ground term transitions of Fe X.

The lines of the multiplet $3p^5\ ^2P$–$3p^4 4s\ ^2D$ at 94.08 and 95.44 Å and the multiplet $3p^5\ ^2P$–$3p^4 4s\ ^2P$ at 96.12 Å appear to be too strong by a factor of 5 or more. These lines are included in table 1 because of the remarkably close coincidence in wavelength between 5 lines of these multiplets observed in the solar spectrum and in the laboratory (Behring *et al.* 1972).

iii) Fe XI

The identification of the strong emission line at 182.16 Å as a transition of Fe XI as suggested by Fawcett, Gabriel, and Jordan (1968) appears to be certain from the intensity analysis. Zirin (1968) had previously identified this intense line as a transition in Fe X near 182.31 Å. The method of deconvolution used here indicates that the transition of Fe X proposed by Zirin instead is a weaker line near 182.39 Å (table 1) in the wing of the intense Fe XI line. The experimental intensity of this line is in good agreement with the predicted intensity of the $3p^5\ ^2P_{1/2}$–$3p^4 3d'\ ^2P_{3/2}$ line of Fe X based on the experimental intensities of the other components of the multiplet and on lines of other multiplets of Fe X.

There is a line in the solar spectrum near 89.72 Å which has been identified by Widing and Sandlin (1968) as due to the intercombination transition $3p^4\ ^1D_2$–$3p^3 4s\ ^3D_3$

of Fe XI. We believe that this identification is incorrect, since it appears to have the same intensity as the line $3p^4\ ^3P_2$–$3p^3 4s\ ^3D_3$ at 86.92 Å which originates from the same upper level as the 89.72 Å line and terminates on the ground level of the triplet system.

The relative intensities of the lines of the multiplet $3p^4\ ^3P$–$3p^3 4s\ ^3D$ of Fe XI are in agreement with their calculated values, but the lines appear to be too intense by a factor of about 2 relative to the other unblended lines of Fe XI. Jordan (1968) has pointed out the anomalously high intensities of these same lines recorded on earlier spectra.

The two intense components of the transition $3p^4\ ^3P$–$3p^3 3d''\ ^3P$ of Fe XI at 188.23 and 192.80 Å have been observed in the solar spectrum several times (Freeman and Jones 1970; Behring *et al.* 1972; Schweizer and Schmidtke 1971). As can be seen from table 1, the agreement between the measured and predicted wavelengths of the lines is good. The relative intensities of the two components are also in good agreement with their calculated values. The values of $A_E \int n_e^2 dh$ for the lines, however, are not listed in the table because their intensities and hence the values of $A_E \int n_e^2 dh$ are larger by about a factor of 6 than the values of that quantity for other spectral lines of the same ion. Schweizer and Schmidtke (1971) have obtained a high-spectral-resolution photograph of the solar spectrum in the neighborhood of these lines of Fe XI which clearly shows that the feature near 188.3 Å is a blend consisting of an intense line at 188.29 Å and a less intense line at 188.37 Å. The deconvolution method used here indicates that the blend at 188.3 Å consists of three lines, one being the intense line of Fe XI at 188.23 Å given in table 1, another weaker line at 188.45 Å (5.8×10^{-3} ergs cm^{-2} s^{-1}) that is probably the less intense line first observed by Schweizer and Schmidtke, and an even weaker line at 188.70 Å (1.7×10^{-3} ergs cm^{-2} s^{-1}).

iv) Fe XVIII

The multiplet of Fe XVIII given in table 1 is a suggested identification based on the coincidence of the solar wavelengths with accurate laboratory wavelengths. It should be noted that the quantity $A_E \int n_e^2 dh$ for the multiplet is significantly less than that quantity for the multiplets of the ions Fe XIII to Fe XV. This decrease in $A_E \int n_e^2 dh$ at temperatures where Fe XVIII is formed relative to the peak value of the quantity at lower temperatures where Fe XIII–Fe XV are formed is also observed for the high stages of ionization of nickel, which supports the present line identification. These two spectral lines at 103.95 and 93.93 Å are also observed in the spectrum of Behring *et al.* (1972) and in the spectrum of Manson (1972). In the latter spectrum these lines have approximately the same relative intensities as those given in table 1.

h) Nickel

The present analysis indicates that the solar line near 91.8 Å is too intense by a factor of about 10 to be associated with the $3d\ ^2D$–$4f\ ^2F$ multiplet of Ni X as suggested by Jordan (1965), Widing and Sandlin (1968), Freeman and Jones (1970), and Behring *et al.* (1972). The calculated relative intensity of the $3p^6 3d\ ^2D$–$3p^5 3d^2\ ^2F$ multiplet to the $3d\ ^2D$–$4f\ ^2F$ multiplet of Ni X is approximately 8 if it is assumed that the 91.8 Å line is the $3d\ ^2D$–$4f\ ^2F$ multiplet of Ni X while the experimental ratio is close to unity. There is good agreement between the calculated and experimental ratios for these two multiplets in Fe VIII which is in the same isoelectronic sequence as Ni X.

IV. ABUNDANCE DETERMINATIONS

The procedure generally used to determine solar abundances from the EUV intensity data is to plot the values of $A_E \int_R n_e^2 dh$ as a function of the temperature

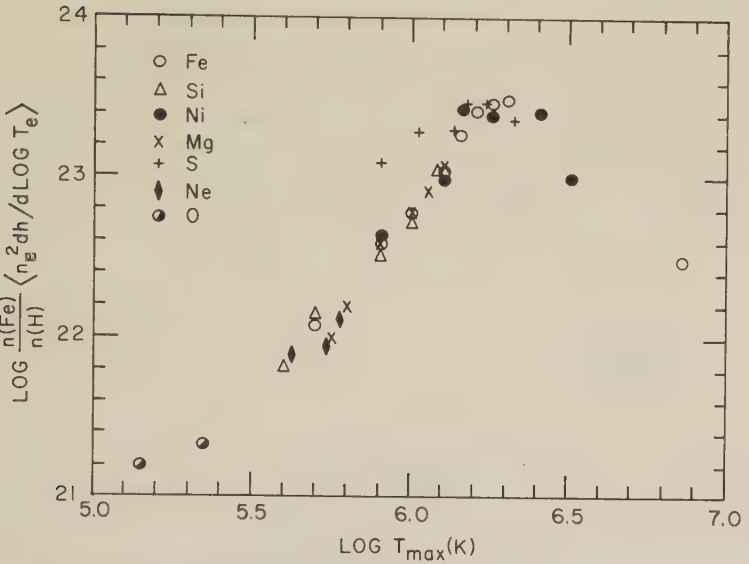


FIG. 2.—The values of $n(\mathrm{Fe})/n(\mathrm{H})\langle n_e^2 dh/d \log T_e\rangle$ obtained by fitting the data of six elements to iron.

region in which the spectral lines of the ions of a given element are predominantly emitted. The data for each element are then fitted to one element to give a common curve of least scatter and the fitting procedure gives the abundances of the elements relative to the common element. Some scatter in the data which define this curve is introduced by the different relative temperature ranges $\Delta T/T$ over which the spectral lines are emitted. This scatter can be reduced if the values of $A_E \int n_e^2 dh$ are divided by $\Delta T/T$. This procedure (Heroux *et al.* 1972) gives the average value $A_E\langle n_e^2 dh/d \log T_e\rangle$ for the temperature region in which the spectral line is emitted.

The temperature distribution of the quantity $A_E\langle n_e^2 dh/d \log T_e\rangle$ for several elements fitted to the common element iron is given in figure 2. One value of $A_E\langle n_e^2 dh/d \log T_e\rangle$ is plotted for each ion species. This plotted value was obtained by averaging the quantities $A_E\langle n_e^2 dh/d \log T_e\rangle$ for the different spectral lines of the ion tabulated in table 1.

A preliminary determination of $[n(\mathrm{Fe})/n(\mathrm{H})]\langle n_e^2 dh/d \log T_e\rangle$ versus T obtained from the same photoelectric data used to determine figure 2 has been given by Heroux *et al.* (1972). Two additional elements, sulfur and nickel, have been added to the data in figure 2. With the exception of the sulfur data, the scatter in the data about the common curve in figure 2 has been considerably reduced in comparison to the scatter in the earlier data which were based on fewer spectral lines and on atomic parameters that were generally different from the values used here.

The abundances of the elements relative to iron deduced from the present analysis are compared to other solar-EUV abundance determinations in table 2. As can be seen from figure 2, the error in the present determination of the abundance of oxygen relative to iron is expected to be large because of the uncertainty in fitting oxygen to the common curve. If the two data points for oxygen are raised by 0.2 dex, an equally good fit to the common curve would be obtained giving a value of log O/Fe = 1.0 rather than the adopted value of 1.25. Because only three closely spaced data points are used for neon, the error in the relative abundance of neon and iron can also be

TABLE 2

COMPARISON OF ABUNDANCES FROM PERMITTED SOLAR EUV SPECTRAL LINES: VALUES OF LOG $n(E)/n(\mathrm{Fe})$

Element	Pottasch*	Jordan†	Dupree‡	Present Results
O.....	+0.85	+0.77	+1.48	+1.25
Ne.....	−0.07	+0.32	+0.15	+0.66
Mg.....	−0.24	+0.07	+0.18	+0.42
Si.....	0.00	−0.03	+0.25	+0.26
S.....	−0.45	−0.33	+0.01	−0.60
Fe.....	0.00	0.00	0.00	0.00
Ni.....	−1.24	−1.23	...	−1.30

* Pottasch 1968.
† Jordan 1965.
‡ Dupree 1971; tabulated by Withbroe 1971.

large. Because the two low-temperature data points in figure 2 corresponding to S VIII and S IX were derived from blended lines (see table 1), the data for S X through S XIII have been favored in the construction of figure 2 and in the determination of the sulfur abundance in table 2.

It is of interest to compare the calculated and experimental intensities of the spectral lines of the lithium-like ions, since this comparison provides a check of the consistency of the intensity data in table 1 upon which the abundances of table 2 are based. Fairly good agreement (to within a factor of 2) was obtained previously between the calculated and experimental intensities of the transitions $2s$–$2p$, $2s$–$3p$, $2p$–$3s$, and $2p$–$3d$ in the ions O VI, and Mg X (Heroux *et al.* 1972). For Ne VIII, the calculated and experimental intensities of the $2s$–$2p$ resonance transition and the $2p$–$3s$ transition also appeared to be in good agreement. However, the intensity of the $2p$–$3s$ transition of Ne VIII near 103 Å has been increased by a factor of about 2 in table 1 in comparison to the previous intensity because of the manner of accounting for the background in the vicinity of the line. In addition we believe that the intensities of the two additional $2s$–$3p$ and $2p$–$3d$ transitions in Ne VIII given in table 1 are accurate to within ±30 percent, so that a more meaningful comparison can now be made of the calculated and experimental intensities for this ion.

The results of the comparison for the ions O VI, Ne VIII, and Mg X are summarized in table 3. The calculated intensities, $I(l, p)$ in photons $\mathrm{cm}^{-2}\,\mathrm{s}^{-1}$ for the transition between the lower level l and upper level p, were obtained by evaluating the integral

$$I(l, p) = 8.6 \times 10^{-6} \frac{n(E)}{n(\mathrm{H})} \int \frac{n(i)}{n(E)} X(g, p) n_e^2 (dh/d \log T_e) d \log T_e ,$$

TABLE 3

COMPARISON OF CALCULATED AND EXPERIMENTAL ABSOLUTE INTENSITIES*

	$2s$–$2p$		$2s$–$3p$		$2p$–$3s$		$2p$–$3d$	
ION	Exp.	Calc.	Exp.	Calc.	Exp.	Calc.	Exp.	Calc.
O VI.....	4000	1670	19.0	13	18.5	14	38	26
Ne VIII.....	510	1430	11.5	11	11	11	21	22
Mg X.....	930	1820	11.6	14	14	13	22	25

* In units of 10^6 photons $\mathrm{cm}^{-2}\,\mathrm{s}^{-1}$.

where $[n(E)/n(\mathrm{H})]n_e^2 dh/d\log T_e$ versus $\log T_e$ was obtained from the data given in figure 2 and the relative abundances given in table 2. Jordan's values of $n(i)/n(E)$ and the electron excitation rate coefficients $X(g, p)$ previously given by Heroux *et al.* (1972) were also used to calculate the intensities. The experimental intensities obtained by the deconvolution method used here are somewhat different from those previously tabulated but, except for the $2p$–$3s$ transition of Ne VIII, the intensities agree within their estimated limits of error. When one considers the sources of error possible in the calculations of the spectral-line intensities of the lithium-like ions, the agreement between the calculated and experimental intensities indicated in table 3 is remarkably good.

We wish to thank Alfred Vidal-Madjar of the Laboratoire de Physique Stellaire et Planetaire for help in applying his computer program to the deconvolution of blended spectral lines, Sylvie Sahal of the Observatoire de Paris, Meudon, for many theoretical discussions, and James E. Manson of the Air Force Cambridge Research Laboratories for making unpublished solar EUV data available to us.

REFERENCES

Austin, W. E., Purcell, J. D., Snider, C. B., Tousey, R., and Widing, K. G. 1967, *Space Research*, **7**, 1252.
Austin, W. E., Purcell, J. D., Tousey, R., and Widing, K. G. 1966, *Ap. J.*, **145**, 373.
Bates, D. R., and Damgaard, A. 1949, *Phil. Trans. Roy. Soc. London, A*, **242**, 101.
Behring, W. E., Cohen, L., and Feldman, U. 1972, *Ap. J.*, **175**, 493.
Bely, O. 1966*a*, *Proc. Phys. Soc.*, **88**, 587.
———. 1966*b*, *Ann. Ap.*, **29**, 683.
Blaha, M. 1969, *Ap. J.*, **157**, 473.
Czyzak, S. J., and Krueger, T. K. 1966, *Ap. J.*, **144**, 381.
Dupree, A. K. 1971, *Bull. A.A.S.*, **3**, 246(A).
Fawcett, B. C. 1970, *J. Phys. B*, **3**, 1732.
———. 1971, Culham Laboratory Report, ARU-R2.
Fawcett, B. C., Cowan, R. D., Kononov, E. Y., and Hayes, R. W. 1972, *J. Phys. B*, **5**, 1255.
Fawcett, B. C., Gabriel, A. H., Irons, F. E., Peacock, N. J., and Saunders, P. A. H. 1966, *Proc. Phys. Soc.*, **88**, 1051.
Fawcett, B. C., Gabriel, A. H., and Jordan, C. 1968, *Ap. J.* (*Letters*), **152**, L119.
Fawcett, B. C., Gabriel, A. H., and Saunders, P. A. H. 1967, *Proc. Phys. Soc.*, **90**, 863.
Fawcett, B. C., Peacock, N. J., and Cowan, R. D. 1968, *J. Phys. B*, **1**, 295.
Freeman, F. F., and Jones, B. B. 1970, *Solar Phys.*, **15**, 288.
Gabriel, A. H., Fawcett, B. C., and Jordan, C. 1965, *Nature*, **206**, 390.
———. 1966, *Proc. Phys. Soc.*, **87**, 825.
Garstang, R. H. 1962, *Ann. d'Ap.*, **25**, 109.
Hall, L. A., Schweizer, W., Heroux, L., and Hinteregger, H. E. 1965, *Ap. J.*, **142**, 13.
Heroux, L., Cohen, M., and Malinovsky, M. 1972, *Solar Phys.*, **23**, 369.
Hinteregger, H. E., Hall, L. A., and Schweizer, W. 1964, *Ap. J.*, **140**, 319.
Jordan, C. 1965, thesis, University of London.
———. 1966, *M.N.R.A.S.*, **132**, 515.
———. 1968, *J. Phys. B*, **1**, 1004.
———. 1969, *M.N.R.A.S.*, **142**, 501.
Kastner, S. O. 1967, *Solar Phys.*, **2**, 196.
Kelly, R. L. 1968, *Atomic Emission Lines Below 2000 Å, Hydrogen through Argon* (Washington: Government Printing Office).
Manson, J. E. 1967, *Ap. J.*, **147**, 703.
———. 1968, *Ap. J.* (*Letters*), **153**, L191.
———. 1972 (private communication).
Nussbaumer, H. 1972, *Astr. and Ap.*, **16**, 77.
Pottasch, S. R. 1964, *Space Sci. Rev.*, **3**, 816.
———. 1968, *Origin and Distribution of the Elements*, ed. L. H. Ahrens (Oxford: Pergamon Press), p. 183.
Schweizer, W., and Schmidtke, G. 1971, *Ap. J.* (*Letters*), **169**, L27.
Smith, M. W., and Wiese, W. L. 1971, *Ap. J. Suppl.*, **23**, 103.
Tondello, G., and Paget, T. M. 1970, *J. Phys. B*, **3**, 1757.
Van Regemorter, H. 1962, *Ap. J.*, **136**, 906.

Vidal-Madjar, A. 1971 (private communication).
Widing, K. G., and Sandlin, G. D. 1968, *Ap. J.*, **152**, 545.
Widing, K. G., Sandlin, G. D., and Cowan, R. D. 1971, *Ap. J.*, **169**, 405.
Wiese, W. L., Smith, M. W., and Glennon, B. M. 1966, *Atomic Transition Probabilities*, Vol. **1** (Washington: Government Printing Office).
Wiese, W. L., Smith, M. W., and Miles, B. M. 1969, *Atomic Transition Probabilities*, Vol. **2** (Washington: Government Printing Office).
Withbroe, G. L. 1971, *The Menzel Symposium on Solar Physics, Atomic Spectra, and Gaseous Nebulae*, ed. K. B. Gebbie, NBS Special Publication 353 (Washington: Government Printing Office), p. 127.
Zirin, H. 1968, *Ap. J.*, **151**, 383.

ARTICLE 3

Ceci est un preprint d'un article accepté dans Astronomy and Astrophysics (1975).

De nouvelles données atomiques sont fournies pour l'ion OV. Une structure atomique comprenant neuf configurations est déterminée, compte tenu des effets de l'interaction de configuration et de l'interaction spin orbite. Les fonctions d'onde ainsi obtenues ont été utilisées pour calculer les coefficients d'excitation. Des équations de l'équilibre statistique, on a déduit la variation de certains rapports d'intensité de raies avec la densité N_e et la température T_e électroniques. L'importance des effets de resonance, négligés jusqu'à présent, dans les sections de choc entre niveaux de structure fine de l'état $2s\ 2p\ ^3p$ est soulignée. Leur inclusion permet de clore la controverse et de supprimer le désaccord entre les observations et les précédents calculs.

Il est montré comment les paramètres physiques (N_e, T_e), déduits des rapports d'intensité observés, sont sensibles à la précision avec laquelle les données atomiques sont déterminées.

TITLE : New calculations of atomic data concerning E.U.V. lines of O V

BY : Monique MALINOVSKY

Laboratoire de Physique Stellaire et Planétaire
91370 - VERRIERES LE BUISSON

CURRENT TITLE :

Atomic data for O V

Address for the proofs

M. MALINOVSKY
L.P.S.P.
B.P. n° 10
91370 - VERRIERES LE BUISSON

SUBDIVISION :

Physical Processes

Main Journal

Postal address of the author :

M. MALINOVSKY

L.P.S.P. B.P N° 10
91370 VERRIERES LE BUISSON

S U M M A R Y

New values of transition probabilities and cross sections are given for O V. They are calculated in a coherent way : firstly, atomic wave functions are calculated in a Thomas Fermi potential ; spin orbit and electrostatic interaction configuration is taken into account. Nine configurations are included. Atomic probabilities transitions follow. Secondly, the preceding wave functions are used to calculate the electron collision strengths with the distorted wave approximation, and the proton collision strengths with a semi classical approximation. Equations of statistical equilibrium are solved from which theoretical variation of line ratios with electron density N_e and electron temperature T_e are deduced. Resonances in the fine structure collision strengths between the levels of the $2s2p\ ^3P$ term are shown to be of a drastical importance.

Values of electron density N_e, and electron temperature T_e, are then deduced from appropriate U.V. observed line ratios. The sensitivity of these physical parameters (N_e, T_e) to the remaining uncertainties in atomic data is discussed.

Key Words : EUV Coronal Lines - Atomic Structure - Cross Sections- Statistical Equilibrium Equations.

I. INTRODUCTION

From simultaneous observations of the solar O V $2s^2\ ^1S$ - $2s2p\ ^1P$, $2s^2\ ^1S$ - $2s3p\ ^1P$ and $2s2p\ ^3P$ - $2p^2\ ^3P$ transitions, Malinovsky et al (1973) have deduced an electron temperature T_e and an electron density N_e for the region emitting these lines. In that paper, calculations of statistical equilibrium by Munro et al. (1971) were used to deduce N_e from the observed intensity ratio $I(2s2p\ ^3P - 2p^2\ ^3P) / I(2s^2\ ^1S - 2s2p\ ^1P)$. Similar calculations by Jordan (1971) including the same processes, but different atomic data, lead to values for this intensity ratio higher by a factor of 3.2, so that, anormalously low electron densities are deduced from observed line ratio

Meanwhile Loulergue and Nussbaumer (1974) have doubted whether it is meaningful to assign a unique pair N_e, T_e to the regions emitting C III an ion which is isolectronic with O V. With their atomic data they arrive at an electron pressure for the C III regions which is considerably below the coronal pressure, thus questioning previously accepted concepts of the transition region. Jordan (1974) had doubted this conclusion invoking possible errors in atomic data. It is therefore highly desirable that O V should be investigated thoroughly in an attempt to clarify the controversial situation. This work calculates all the relevant atomic data for O V. It is shown that previously neglected resonance effects on the $2s2p\ ^3P_J$ - $2s2p\ ^3P_J$, cross sections are of a drastic importance, in the case of O V, for the calculated relative intensities. The influence of the remaining uncertainties in the atomic data, on the line intensities is discussed. These calculated emissivities are then compared to observed intensity ratio.

II. TRANSITIONS PROBABILITIES

The transition probabilities have been determined by means of the program of Eissner and Nussbaumer (1969) and Jones (1970). The wave functions of the bound states are calculated with a parametric potential of the Thomas-Fermi type, adjusted in order to minimize the total energy of the states included in the calculation.

Configuration mixing through electrostatic or spin-orbit interaction is taken into account in this program for the nine configurations : $2s^2$, 2s2p, $2p^2$, 2s3s, 2s3p, 2s3d, 2p3s, 2p3p, 2p3d.

Although the three last configurations are not introduced in the statistical equilibrium (see below) they were added to improve the wave functions. The main result of the addition of these three configurations is the reproduction of the experimental fact that the 3p ^{1}P term lies below the 3p ^{3}P term.

The energy of the levels of the six former configurations, as predicted by this calculation, are compared with experimentally determined values (Kelly 1968) in Table I. The coincidence is better than 5% between the experimental and theoretical energies. Moreover, the fact that the inversion between the two terms ^{1}P and ^{3}P of the 2s3p configuration is correctly reproduced, gives confidence in the bound wave functions thus determined.

In Table IIa and IIb, the first column lists values of transition probabilities A (J→i) for electric and magnetic dipole and quadrupole transitions respectively.

In Table IIa, the second column gives the values published by Nussbaumer (1972) as the results of a computing program based on the same method, they agree within 20% with those of column (1). For comparison, we also reproduced, in column (3) and (4) of the Table IIa, the values taken by Munro et al. (1971) and Jordan (1971) respectively.

Jordan used the values of Wiese et al. (1966) for permitted transition probabilities, which are self consistent fields calculations that do not include the important effects of configuration interaction ; accuracies of within 50% are indicated.

To estimate line strengths for permitted transitions Munro et al. have adopted the charge expansion procedure of Cohen and Dalgarno (1964), the accuracy of which, should be comparable with that of the Hartree-Fock approximation, according to these authors. They allow only for configuration interaction between two configurations : $2s^2$ and $2p^2$.

The dispersion of 20% between these different values represents the accuracy with which the transition probabilities are known.

Nicolaïdes et al. (1973) and Sims and Whitten (1973), using different approximations for the wave functions, both obtained for the oscillator strength f($2s^2\ ^1S$ - $2s2p\ ^1P$) the value 0.51. The accuracy of their calculation should certainly be better than 10 % and even better than 2 % as claimed by Sims and Whitten. As pointed out by Nicolaïdes et al. the calculated values lie about 10 % above the experimental values but this need not indicate a real discrepancy because difficulties arise from cascades in deducing oscillator strengths from beam foil spectroscopy experiment.

It seems then reasonable to give an accuracy of 10% for A(2s2p $^1P \rightarrow 2s^2\ ^1S$) while keeping an estimated accuracy of 20% for the other transitions probabilities, though it could be better.

III. EXCITATION COLLISION RATES

III. 1. Electrons

The collision strengths $\Omega(i,j)$ are calculated in L-S coupling with the distorted wave (D.W.) method using the programs of Eissner (1972), and Saraph (1970). These programs employ the same set of bound state wave functions as the atomic structure program does. Collision strengths for transitions between fine structure levels are then available from the program described by Saraph (1972). The numerical coefficients necessary to specify the degree of configuration interaction and intermediate coupling of the bound state wave functions are obtainable from the solution of the atomic structure program in intermediate coupling. This computation shows that spin-orbit interaction is quite negligible for $O\overline{V}$ so that the transformation of the reactance matrix computed in L-S coupling is purely algebraic.

In order to ensure the convergence of the total collision strength enough intermediate states must be included in the sommation

$$\Omega(\tau LS,\tau'\ L'S') = \sum_{L^T} \Omega^{L^T}$$

where Ω^{L^T} is the partial collision strength computed in L-S coupling, for a given total orbital momentum L^T of the system (ion + incident electron). This summation was performed from $L^T = 0$ to $L^T = 12$. This was sufficient, except, for some stronger transitions. For these, which are electric dipole transitions, the contribution to the total collision strength, arising from larger values of L^T has been evaluated by means of the semi-classical impact parameter method of Burgess (1964).

Results $\Omega(i,j)$ in intermediate coupling are given in Table III at four values of the energy of the incident electron relative to the $2s^2\,{}^1S$ ground state (E = 1.6, 2.0, 3.0 and 8.0 Ryd) for all transitions $2s^2\,{}^1S$ and $2s2p\ {}^3P$.

For electric dipole transitions comparison between collision strengths computed by the distorted wave (D.W.) and semi-classical (S.C.) method represents a good check of the reliability of the values obtained provided that the same atomic data are used. Figures 1, 2, 3 represent the variation of collision strength $\Omega(E)$ with the energy E of the incident electron in these two approximations, for the transitions : $2s^2\,{}^1S$ - $2s2p\ {}^1P$, $2s2p\ {}^3P$ - $2p^2\ {}^3P$, $2s^2\ {}^1S$ - $2s3p\ {}^1P$, which are the most important ones involved in the discussion below. The agreement is better than 15 % for the $2s2p\ {}^3P$ - $2p^2\ {}^3P$ transition.

Special attention should be drawn to the collision strength for $2s^2\ {}^1S$ - $2s2p\ {}^1P$ transition. Figure 1 presents the close coupling (C.C) value at E = 2 Ryd, which arises from a calculation of Osterbrock (1970) including two configurations. The oscillator strength calculated by means of the program of Eissner, Jones and Nussbaumer for a two configurations atomic structure was introduced as data in the semi-classical program. The fact that the close coupling point lies on the semi-classical curve means that collisionnal coupling effects are negligible. The extremely good agreement (<10%) found between the D.W and S.C. values, both calculated in a nine configurations atomic structure show that no quantum effects occur ; therefore one can predict that the corresponding close coupling value should lie very close.

With regard to the $2s^2\ ^1S - 2s3p\ ^1P$ transition, the distorted wave value lies a factor of 4 below the semi-classical ones. This large discrepancy seems to indicate that there is some trouble with the D.W. value. In fact, this collision strength has to be at least, of the same order as the $2s^2\ ^1S_o - 2s3s\ ^1S_o$ which is a strongly forbidden transition. But the D.W method yields a value four times higher for this latter collision strength. Therefore, because the three levels 3s, 3p, 3d are close, collisional coupling effects neglected in the D.W method, might be important, so that, the close coupling coupling method will be necessary to obtain a reliable value. It can be noted that the same situation arises for the lithium - like ions. Flower (1971) has pointed out a discrepancy between the distorted wave and close coupling values of $\Omega(2s^2S - 3p^2P)$ for $N\overline{V}$; near threshold, the D.W. value is 1.6 times smaller than the close coupling value. So the $\Omega(2s^2\ ^1S - 2s3p\ ^1P)$ distorted wave result is probably underestimated by a factor two at least. An average value between the D.W. and S.C. values has been adopted with an estimated accuracy of a factor two.

Generally speaking, Flower and Launay (1973) studying the CIII ion of the same iso electronic sequence as $O\overline{V}$, concluded that, for strong transitions, owing to the good agreement between close coupling and distorted wave values, the accuracy of D.W. results is determined by the precision of the bound state wave functions. For this reason, the uncertainty in the collision strengths for the electric dipole transitions is estimated to be $\pm$ 20% with exception of the $2s^2\ ^1S - 2s3p\ ^1P$ transition and reduced to $\pm$ 10% for $(2s^2\ ^1S - 2s2p\ ^1P)$.

For energies above the 2s3d ^1D theshold all the channels are open and the collision strengths are slowly varying functions of energy. But below this threshold the collision strengths have complicated structure due to the presence of levels of autoionization of O^{+3} converging on each new threshold. The average effect of resonances on these levels is to enhance by $\Delta\Omega$ the collision strength below the new threshold. This effect is particularly important for forbidden transitions such as ($2s^2\ ^1S$ - $2s2p\ ^3P$) and ($2s2p\ ^3P_J$ - $2s2p\ ^3P_{J'}$).

A simple way of accounting for the resonances can be used : for incident energy below a new threshold which contains p degenerate closed channels, the collision strength averaged over resonances $\langle\Omega(i,i')\rangle$ between two open channels (i,i') have been calculated using a formula derived by Gailitis (1963) and Seaton (1969). For each angular momentum L^T or J^T, they write :

$$\langle\Omega(i,i')\rangle = \Omega^e(i,i') + \Delta\Omega(i,i')$$

with

$$\Delta\Omega(i,i') = \sum_p \frac{\Omega^e(i,p)\ \Omega^e(p,i')}{\sum_{i''<p} \Omega^e(p,i'')} \qquad (1)$$

In this expression Ω^e are partial collision strengths extrapolated to energies below the new threshold from D.W. calculations obtained for energies above this threshold ; p is summed over degenerate closed channels of the new threshold and i" is summed over all channels which remain open.

When the opening of the new threshold corresponds to a permitted transition with the upper and the lower level of the transition studied, a formula simpler than (1) can be used. In that case high values of L^T (or J^T) play a role, therefore the S.C. approximation is valid and the collision strength is proportional to the transition probability. One can show that the Gailitis formula becomes :

$$\Delta\Omega(i,j) = \Omega^{e}(i,k) \frac{A(k,j)}{\sum_{j<k} A(k,j)} \qquad (2)$$

$\Delta\Omega(i,j)$ is here directly obtained between levels. A similar approach was used by Petrini (1970) who showed that, when interference terms due to the overlapping of resonances may be neglected, the Gailitis formula enables one to obtain results valid within better than 20%.

Below the 2s 2p ^{1}P threshold the collision strength $\Omega(2s^2\ ^1S - 2s2p\ ^3P)$ is greatly affected by resonances as the lower level of the transition is coupled by strong dipole potential to the closed channels. Linear extrapolation was performed in the Gailitis formula owing to calculations at an energy close to the 2s2p ^{1}P threshold (E = 1.6 Ryd) and another one, far enough above this threshold (E = 3 Ryd). Calculation of averaged effects of resonances just below $2p^2\ ^3P$, $2p^2\ ^1D$ and $2p^2\ ^1S$ levels have been made at E = 3 Ryd.

Results are collected in Table IV for the partial waves which contribute to the total effect.

The other levels under consideration here, also introduce resonances on $\Omega(2s^2\ ^1S - 2s2p\ ^3P)$; but as they are weakly coupled either with the upper or the lower level of the transition, the mean effect they introduce will be as weak as for the $2p^2$ terms. The collision strength $\Omega(2s^2\ ^1S - 2s2p\ ^3P)$ averaged over the resonances is represented in Figure 4 where the C.C. results of Osterbrock (1970) are reported for comparison. The 10 % difference between these two results is largely due to the strong configuration interaction between $2s^2\ ^1S$ and $2p^2\ ^1P$ as already noticed for C III by Hershkowitz et al. (1973).

The fine structure collision strengths in the 2s2p ^3P_J levels are also greatly affected by resonances. The average effect of these infinite series of resonances converging on levels $2p^2\ ^3P$, 2s3s ^{3}S, 2s3d ^{3}D are calculated

using formula (2). The result of this calculation given in Table V shows that the large contribution comes from level $2p^2\ ^3P$ which is strongly coupled with $2s2p\ ^3P$. As the S. C. approximation is very good for $\Omega(2s2p\ ^3P - 2p^2\ ^3P)$, this formula (2) is expected to give a good estimation of the average enhancement $\Delta\Omega$. In order to estimate the contribution of the other closed channels, the calculation was also made using Gailitis formula below $2s2p\ ^1P$ threshold.

Figure 5 summarizes the resulting structure of the fine structure collision strengths in the $2s2p\ ^3P$ term. The estimated error in these collision strengths

In order to obtain the excitation collision rate $\alpha^e(i\to j)$ at a temperature T_e the collision strength has to be integrated over the Maxwellian distribution of energy at T_e :

$$\alpha^e(i\to j) = \frac{8.63\ 10^{-6}}{\omega_i \sqrt{T_e}} \int_{\frac{\Delta E_{ij}}{kT}}^{\infty} \Omega(E)\ \exp(-E/kT_e)\ d(E/kT_e) \qquad (3)$$

ω_i is the statistical weight of the level.

In order to perform the integration, the curve $\Omega(E)$ has been interpolated between the calculated values. For energies greater than E_n = 8 Ryd a suitable asymptotic shape of the curve $\Omega(E)$ was adopted according to the nature of the transition :

$\Omega(E) = \Omega(E_n)\ \frac{\text{Log } E}{\text{Log } E_n}$ for permitted transitions

$\Omega(E) = \Omega(E_n)$ for Δl forbidden transitions

$\Omega(E) = \Omega(E_n) \left(\frac{E_n}{E}\right)^2$ for spin forbidden transitions.

It should be noted that for $T_e = 2.5 \times 10^5$ °K ($kT \simeq 1.6$ Ryd) the part of the curves $\Omega(E)$ which contributes most to the integral $C(i \to j)$ lies near the threshold. The effect of the resonances is to enhance the collision rate $\alpha^e(2s^2\ {}^1S \to 2s2p\ {}^3P_1)$ by a factor 2, the collision rates $\alpha^e(2s2p\ {}^3P_0 \to 2s2p\ {}^3P_1)$, $\alpha^e(2s2p\ {}^3P_0 \to 2s2p\ {}^3P_2)$ and $\alpha^e(2s2p\ {}^3P_1 \to 2s2p\ {}^3P_2)$ respectively by a factor 1.8, 3.4 and 2.5.

III.2. Protons

It has been shown by Sahal-Brechot (1974) that the semi-classical perturbation theory with cut-off is sufficient for calculations of fine structure collision rates $\alpha^p(i \to j)$ of positive ions by protons (accuracy 20%). This method was applied for the transitions between the levels of the $2s2p\ {}^3P$ and $2p^2\ {}^3P$ terms ; the results are reproduced on Figure (6).

IV. RESOLUTION OF THE STATISTICAL EQUILIBRIUM EQUATIONS

If N_i, N_j, N_k represent the populations of the levels i, j, k of the O^{+4} ion, the equation of statistical equilibrium for each level N_j can be written, in a general way, as follows :

$$N_j \left\{ \left(\sum_{k>j} N_e\, \alpha(j \to k) + \sum_{i<j} \left(A(j \to i) + N_e\, \alpha(j \to i) \right) \right\} = \sum_{k>j} N_k \left[A(k \to j) + N_e\, \alpha(k \to j) \right] + \sum_{i<j} N_i\, N_e\, \alpha(i \to j) \qquad (4)$$

where $\alpha(i \to j)$ denotes the total collisional rate for the transition $i \to j$ which is the sum $\left| \alpha^e(i \to j) + 0.8\, \alpha^p(i \to j) \right|$ of the contributions of electron and proton impact. In this sum, the proton density is taken equal to $0.8\, N_e$.

Upper levels are essentially populated from the ground and metastable states.

The set of equations (4) written for the twenty levels listed in Table I was solved by matrix inversion techniques.

As observed UV lines on the spectra of Heroux coïncide in wavelength with lines issued from the 2s31 levels of $O\overline{V}$, these levels are considered for solving the system of statistical equilibrium equations ; although they alter very slightly the population distribution. Omission of the configuration 2p31 is justified by the much smaller excitation to these levels.

The solutions of the system of equations (4) are the populations of the levels, from which the emissivity $\varepsilon(j\to i)$ per ion is deduced for each line by

$$\varepsilon(j\to i) = N_j\, A(j\to i)\, h\nu_{ij} \qquad (\text{erg s}^{-1}\text{ion}^{-1}) \tag{5}$$

The populations N_i verify the relation

$$\sum_i N_i = 1$$

Since the emissivity of each line depends differently upon variations in N_e and T_e, the ratio of selected lines may provide a direct determination of N_e and T_e. Such ratios are

$$\frac{\varepsilon(2p^2\ {}^3P \to 2s2p\ {}^3P)}{\varepsilon(2s2p\ {}^1P \to 2s^2\ {}^1S)} \quad \text{and} \quad \frac{\varepsilon(2s3p\ {}^1P \to 2s^2\ {}^1S)}{\varepsilon(2s2p\ {}^1P \to 2s^2\ {}^1S)}$$

V. TEMPERATURE RANGE FOR THE EMISSION OF THE LINES

For an optically thin line the total emission I(j→i) is

$$I(j \rightarrow i) = \int_R \varepsilon(j \rightarrow i)\, N(O^{+4})\, dV \qquad \text{erg s}^{-1} \qquad (6)$$

where R represents the region of integration, and $N(O^{+4})$ the number of ions O^{+4} per cm^3.

$N(O^{+4})$ may be rewritten as :

$$N(O^{+4}) = \frac{N(O^{+4})}{N(O)} \; \frac{N(O)}{N(H)} \; \frac{N(H)}{Ne} \, Ne \qquad (7)$$

in which $\frac{N(O)}{N(H)}$ is the relative abundance of the element. The ratio $\frac{N(O^{+4})}{N(O)}$ is the concentration of O^{+4} relative to the other stages of ionization. This ratio is determined by ionization balance as calculated by Summers (1972) for chromosphere corona transition region conditions.

The dependance of the total emission with N_e and T_e is then represented by the function

$$G\,(T_e, N_e) = \frac{N(O^{+4})}{N(O)} N_j \qquad (8)$$

In Fig. 7, 8 & 9, these functions are plotted against temperature for $N(2s2p\ ^1P)$, $N\ (2p^3\ ^3P)$ and $N\ (2s2p\ ^1P)$ at $N_e = 10^8$. They approximately peak at $T_e = 2.5 10^5 K$. From their variations, it can be deduced that $O\overline{V}$ lines are emitted in regions of the transition zone where the electron temperature falls within the range $1.6\ 10^5$ -4 $10^{5\circ}$ K.

The observed intensity ratio of two lines is given by :

$$\rho^{obs} = \frac{I(j \to i)}{I(k \to l)} \qquad (9)$$

This ratio is currently assumed equal to the relevant line emissivity :

$$\rho^{obs} = \frac{\varepsilon(j, i)}{\varepsilon(k \to l)} \qquad (10)$$

This is justified only if the two lines are effectively formed in the same regions of the plasma and in addition, if the emissivity varies slowly in the regions of emission.

VI. DETERMINATION OF THE ELECTRON DENSITY N_e

Collisional excitation from the ground level $2s^2\ ^1S$ to the excited level $2s2p\ ^1P$ followed by spontaneous radiative decay to $2s^2\ ^1S$ are the main processes determining the population of the $2s2p\ ^1P$ level. Thus, in a good approximation :

$$N(2s^2\ ^1S) N_e\ \alpha(2s^2\ ^1S \to 2s2p\ ^1P) = N(2s2p\ ^1P)\ A(2s2p\ ^1P \to 2s^2\ ^1S) \qquad (11)$$

Omitting processes which contribute less than 10% to the total rates, collisions from $2s2p\ ^3P$ and spontaneous decay to $2s2p\ ^3P$ determine the population of the term $2p^2\ ^3P$:

$$\sum_{i,j} N(2s2p^3P_i)\ N_e\ \alpha(2s2p^3P_i \to 2p^2\ ^3P_j) = \sum_{i,j} N(2p^{2\,3}P_j)\ A(2p^2\ ^3P_j \to 2s2p^3P_i) \qquad (12)$$

So that the emissivity ratio of the transition $2p^2\,{}^3P - 2s2p\,{}^3P$ at $\lambda = 760\,\mathring{A}$ to $2s2p\,{}^1P - 2s^2\,{}^1S$ at $\lambda = 630\,\mathring{A}$ can be written in a very simple way :

$$\rho\left(\frac{\lambda=760}{\lambda=630}\right) = \left(\frac{630}{760}\right) \times \frac{\sum_{ij} N(2s2p\ {}^3P_i)\ \ \alpha(2s2p\ {}^3P_i \rightarrow 2p^2\ {}^3P_j)}{N(2s^2\ {}^1S)\ \ \alpha(2s^2\ {}^1S \rightarrow 2s2p\ {}^1P)} \qquad (13)$$

This ratio is a sensitive indicator of density provided that the relative population of the metastable level varies significantly with electron density.

It is clear that the ratio $\rho\left(\frac{\lambda 760}{\lambda 630}\right)$ is sensitive to uncertainties in the collision rates involved in expression (11). The major uncertainties come from $\alpha(2s2p\ {}^3P \rightarrow 2p^2\,{}^3P)$, $\alpha\ (2s^2\ {}^1S - 2s\ 2p\ {}^1P)$ and $\alpha(2s\ 2p\ {}^3P_J - 2s2p\ {}^3P_{J'})$

The computed values of this ratio are given in Figure 10 as a function of electron density and temperature. At the temperature $T_e = 2.5\ 10^5$ °K of the maximum of the emission curve $G\ (T_e)$ of formula (8), the emissivity ratio (13) is given as curve (1) in Figure 10. Curves (2) and (3) show the shift of curve (1) when the relevant collision rates vary by the uncertainties indicated above.

At the same temperature, $T_e = 2.5 \times 10^5$ °K, the theoretical ratio has also been calculated without taking into account the important effect of the resonances in the fine structure collision strength of the term $2s2p\ {}^3P$. The result is shown as curve (4). The shift between curve (1) and curve (4) is a measure of the importance of the resonances in the cross sections between the $2s2p\ {}^3Pj$ levels. For comparison, values of the emissivity ratio (13) computed with the atomic data used by Munro et al. (1971) are on curve (5) of Figure 11. Munro et al. have overestimated $\Omega(2s^2\ {}^1S - 2s2p\ {}^1P)$ by a factor 1.55 (see section 3) and underestimated $\Omega(2s2p\ {}^3P - 2p^2\ {}^3P)$ and $\Omega(2s^2\ {}^1S - 2s2p\ {}^3P)$ by a factor 1.2 which explains that curve (5) lies a factor two below curve (4). Munro et al neglect the effect of resonances in the fine

structure collision strength in 2s2p ^3P. This partly balances the above differences in other collision strengths so that curve (5) lies within the error bars limited by curve (2) and (3).

The ratio observed by Malinovsky et al. (1973) is $\rho = 0.085 \pm 0.017$; 80 % of the OSO VI intensity ratios also lie in that interval (Munro et al. 1971). More precisely Munro et al. (1971) give $\rho = 0.06$ and $\rho = 0.01$ for quiet and active regions respectively. By using the boundary curves (2) and (3) of Figure (11) and Munro et al. (1971) observations, the electron density deduced is comprised between the following limits :

$6\ 10^5 < N_e < 2\ 10^9$ for quiet sun

$2\ 10^6 < N_e < 6\ 10^{10}$ for active regions.

It can be noticed that the boundary curve (3), which leads to the upper limits of N_e, gives results which are consistent with currently adopted models of the transition region ; in particular it leads to an increase of a factor of 30 in N_e between quiet and active regions.

Nevertheless, since the observed line ratio lies near the flat portion of the curve which in addition depends also on T_e (Figure 10), one must conclude that this line ratio cannot be used as an accurate density diagnostic for the transition region.

7. DETERMINATION OF ELECTRON TEMPERATURE T_e

As was assumed by Malinovsky et al (1973), the current two levels approximation is valid for the 2s3p ^1P level, that leads to the relation :

$$N\,(2s^2\ ^1S)N_e\ \alpha(2s^2\ ^1S \rightarrow 2s\ 3p\ ^1P) = N(2s3p\ ^1P)\ A(2s3p\ ^1P \rightarrow 2s^2\ ^1S) \quad (12)$$

It follows from (9) and (12) that the two lines intensity ratio

$$\rho\left(\frac{2s3p\ {}^1P \rightarrow 2s^2\ {}^1S}{2s2p\ {}^1P \rightarrow 2s^2\ {}^1S}\right) = \rho\left(\frac{\lambda\ 172}{\lambda\ 630}\right) = \frac{\alpha(2s^2\ {}^1S \rightarrow 2s3p\ {}^1P)}{\alpha(2s^2\ {}^1S \rightarrow 2s2p\ {}^1P)} \qquad (13)$$

is insensitive to electron density.

Owing to the large energy gap between the two levels $2s2p\ {}^1P$ and $2s3p\ {}^1P$, this ratio is a sensitive temperature detector. Figure 11 shows the variation of this ratio against temperature. Curve (1) corresponds to the adopted average value for $\Omega(2s^2\ {}^1S, 2s3p\ {}^1P)$ as discussed in section 3. Curve (2) and (3) respectively reproduce this ratio calculated with S.C. and D.W. values of the above collision stength.

The mean curve (1) yields an electron temperature lying between $3.8 10^5$ °K and $5.6 10^5$ °K meanwhile the curve (2) indicates an electron temperature range of $2.5 10^5$ °K. $3.4 10^5$ °K. If the D.W. collision strength has been adopted as in curve 3, the deduced temperature would be outside the range of temperatures where the lines are emitted.

This confirms, a posteriori, the fact that the D.W. value is underestimated.

CONCLUSION

In this paper, all the atomic data essential for the interpretation of the O V observations were recalculated using the most accurate computing methods which exist at the present time. In particular, resonances in the electron collision strengths have been taken into account when they were important : in the intercombination line $2s^2\ ^1S - 2s2p\ ^3P$ and especially in the fine structure collisions strengths between the $2s2p\ ^3P_J$ levels. It is hown that the nearly flat part of the curve, which represents the theoretical variation of the emissivity ratio $\varepsilon(2s2p\ ^3P - 2p^2\ ^3P) / \varepsilon(2s^2\ ^1S - 2s2p\ ^1P)$ with electron density N_e, extends over a wide range of densities so that densities consistent with those from EUV models can be obtained from the observed intensity ratio. However, it must be concluded that this ratio is not a sensitive density indicator for the densities found in the chromosphere corona transition region.

ACKNOWLEDGMENTS

The author wishes to thank S. Sahal-Brechot of the Meudon Observatory for stimulating suggestions and her advice during the writing of this paper, H. Nussbaumer of E.T.H. of Zürich, D. Flower of the Meudon Observatory and J. Dubau of University College of London for useful discussions. She is also grateful to W. Eissner, M. Jones and H. Saraph (University College) for providing computer programs.

BURGES, A. 1964, Proc. Symposium on Atomic Collision Processes in Plasma, Culham Laboratory, AERE - R4818, 63

COHEN, M. and DALGARNO, A. 1964, Proc. Roy. Soc. A 280, 258

EISSNER, W. 1972, In Physics of Electronic and Atomic Collisions Eds. T.R. Govers and F.J. de Heer, VII ICPEAC, 1971, North Holland Publishing Company, Amsterdam, P 460

EISSNER, W. and NUSSBAUMER, H. 1969, J. Phys. B. 2, 1028

FLOWER, D.R. 1971, J. Phys. B. : Atom. Mol. Phys., 4, 697

FLOWER, D.R. and LAUNAY, J.M, 1973, Astron. and Astrophys. 29, 321

GAILITIS, M., 1963, Sov. Phys. JETT, 17, 1328

GARSTANG, H.P, 1972, Mon. Not. R. Astr. Soc, 158, 255

HERSHKOWITZ, M.D., and SEATON, M.J, 1973, J. Phys. B., 6, 1176

JONES, M. 1970, J. Phys. B. 3, 1571

JORDAN, C. 1971 , Highlights of Astronomy, 519

JORDAN, C. 1974, Astronomy & Astrophys, 34, 69

KELLY, R.L, 1968, Atomic Emission line below 2000 A NAL Report 6648 U.S. Government Printing Office, Washington D.C.)

LOULERGUE, M. and NUSSBAUMER, H. 1974, Astron. and Astrophys., 34, 225

MALINOVSKY, M. HEROUX, L., SAHAL-BRECHOT, S. 1973, Astron. and Astrophys.23, 291

MUHLETHALER , H.P and NUSSBAUMER, H. 1974, (to be published)

MUNRO, R.H., DUPREE, A..K, WITHBROE, G.L, 1971, Solar Phys. 19, 347

NICOLAIDES, C.A., BECK, D.R., and SINANOGLU, O., 1973, J. Phys. B., 6, 62.

NUSSBAUMER, H. 1972, Astr and Astrophys. 16, 77

OSTERBROCK, D.E. 1970, J. Phys. B. 3, 149

PETRINI, D., 1970, Astron. and Astrophys., 9, 392

SAHAL-BRECHOT, S. 1974, Astron. and Astrophys. 32, 147

SARAPH, H.E. 1970, Computer Phys. Communications 1, 232

SARAPH, H.E., 1972, Computer Phys. Communications 3,256

SEATON, M.J., 1969, J. Phys. B., 2, 5

SIMS, J.S., WHITTEN, R.C. 1973, Phys. Rev. A 8, 5, 2220

SUMMERS, H.P, 1972, Mon. Not.R.Astro. Soc., 158, 255

WIESE, W.L, SMITH, M.W. and GLENNON, B.M, 1966, NSR DS-NBS-4 U.S. Govt. Printing Office, Washington, D.C.

CAPTIONS FOR TABLES

I - Observed and calculated values of the energy levels of the 2s , 2s2p, 2p , 2s3s, 2s3p, 2s3d configurations of O V. The observed energies are taken from Kelly (1968)

II - Calculated radiative transition probabilities

IIa - for electric dipole transitions

IIb - for magnetic dipole and quadrupole transitions

III - Intermediate coupling collision strength for transitions induced by electron impact. The level indices are defined in Table I.

IV - Average values of resonances at different thresholds given for each partial wave for $\Omega(2s^2\ {}^1S - 2s2p\ {}^3P)$

V - $\Delta\Omega(i,j)$ for fine structure transitions in $2s2p\ {}^3P$

TABLE I

LEVEL INDEX		ENERGY (Ryd) Calculated	Experimental
1	$2s^2\ ^1S_o$	0	0
2	$2s2p\ ^3P_o$	0.753	0.746
3	1	0.755	0.748
4	2	0.758	0.750
5	$2s2p\ ^1P_1$	1.530	1.447
6	$2p^2\ ^3P_o$	1.972	1.945
7	1	1.974	1.947
8	2	1.976	1.949
9	$2p^2\ ^1D_2$	2.191	2.111
10	$2p^2\ ^1S_o$	2.745	2.624
11	$2s3s\ ^3S_1$	4.969	4.986
12	$2s3s\ ^1S_o$	5.115	5.116
13	$2s3p\ ^1P_1$	5.289	5.295
14	$2s3p\ ^3P_o$	5.301	-
15	1	5.301	-
16	2	5.302	5.313
17	$2s3d\ ^3D_1$	5.472	5.475
18	2	5.472	5.476
19	3	5.472	5.476
20	$2s3d\ ^1D_2$	5.608	5.584

TABLE IIa

Electric dipole transition probabilities $A(j \to i)s^{-1}$ between $2s^2$ 2s2p, $2p^2$, 2s3s, 2s3p, 2s3d (numbers in brackets are power of 10)

j	i	this calculation	Nussbaumer (1972)	Munro (1971)	Wiese (1966)
3	1	2.10 (3)	1.88 (3)	3.6 (3)	
5	1	3.32 (9)	2.74 (9)	2.8 (9)	$3.0 10^9$
6	3	2.34 (9)		2.4 (9)	2.1 (9)
	5	3.22 (3)	3.63 (3)		
7	2	7.87 (8)			6.9 (8)
	3	5.88 (8)			5.2 (8)
	4	9.72 (8)			8.6 (8)
	5	2.20 (2)	3.05 (2)		5.2 (8)
8	3	5.92 (8)			$1.6\ 10^9$
	4	1.76 (9)			
	5	7.26 (3)			
9	3	1.80 (4)			
	4	2.84 (5)			
	5	3.44 (8)	3.62 (8)	4.2 (8)	6.7 (8)
10	3	2.55 (4)			
	5	4.50 (9)	3.20 (9)	4.3 (9)	2.1 (9)
11	2	2.03 (9)			
	3	6.14 (9)			
	4	1.03 (10)			
	5	7.42 (4)			
12	3	2.23 (3)			
	5	7.92 (9)	5.61 (9)		

.../...

j	i	This calculation	Nussbaumer (1972)
13	1	2.95(10)	2.81(10)
	6	7.45(3)	
	7	3.63(4)	
	8	9.22(5)	
	9	4.55(9)	4.23(9)
	10	1.46(8)	
	11	2.43(5)	
	12	1.62(7)	
14	7	6.39(7)	
	11	1.49(8)	
15	1	5.14(7)	
	6	2.19(7)	
	7	1.59(7)	
	8	2.65(7)	
	9	8.68(6)	
	10	2.44(5)	
	11	1.49(8)	
	12	3.47(4)	
16	7	1.68(7)	
	8	4.95(7)	
	9	1.48(3)	
	11	1.51(8)	
17	2	3.70(10)	
	3	2.78(10)	
	4	1.85(2)	
	5	1.91(5)	
	13	1.59(4)	
	14	9.85(6)	
	15	7.32(6)	

j	i	this calculation	Nussbaumer (1972)
18	3	5.00(10)	
	4	1.67 (10)	
	5	1.31 (5)	
	13	3.05 (4)	
	15	1.32 (7)	
	16	4.35 (6)	
19	4	6.67 (10)	
	16	1.74 (7)	
20	3	1.18 (5)	
	4	7.30 (3)	
	5	4.58 (10)	5.11 (8)
	13	1.12 (8)	
	15	1.84 (5)	
	16	1.25 (1)	

T A B L E IIb

Magnetic Dipole Transition A (j→i) s^{-1}

j →i	this calculation	Wiese (1966)
3 → 2	6.26 ($^{+5}_{-}$)	4.6 (+5)
4 → 3	5.26 (-4)	3.9 (-4)
5 → 2	8.65 (-2)	6.4 (-2)
3	6.45 (-2)	1.69 (+1)
4	1.06 (-1)	7.8 (-2)
7 → 6	7.52 (-5)	
8 → 7	3.06 (-4)	

Magnetic quadrupole transition A (j→i)s^{-1}

j →i	Mühlethaler and Nussbaumer (1974)	Garstang (1972)
4 → 1	2.17 10^{-2}	1.3 10^{-2}

TABLE III

Fine structure collision strength for O V

Initial	Final	E = 1.6 Ryd	E = 2.0 Ryd	E = 3.0 Ryd	E = 8.0 Ryd
1	2	0.0280	0.0250	0.0250	0.0141
	3	0.0840	0.0752	0.0750	0.0424
	4	0.1400	0.1252	0.1250	0.0706
	5	2.4850	2.6800	2.9720	3.9390
	6		0.0009	0.0009	0.0005
	7		0.0027	0.0027	0.0014
	8		0.0045	0.0044	0.0024
	9		-	0.0818	0.0723
	10			0.0173	0.0128
	11			-	0.0113
	12				0.1794
	13				0.0559
	14				0.0032
	15				0.0096
	16				0.0158
	17				0.0154
	18				0.0256
	19				0.0363
	20				0.1904

Continued

Initial	Final	E = 1.6 Ryd	E = 2.0 Ryd	E = 3.0 Ryd	E = 8.0 Ryd
2	3	0.3464	0.2964	0.2400	0.1314
	4	0.1576	0.1484	0.1450	0.1240
	5	0.0857	0.0712	0.0413	0.0314
	6	-	0.0224	0.0213	0.0091
	7		1.3500	1.4190	1.9352
	8		0.0324	0.0290	0.0141
	9		-	0.0462	0.0282
	10			0.0046	0.0028
	11			-	0.0152
	12				0.0028
	13				0.0100
	14				0.1236
	15				0.0158
	16				0.0267
	17				0.3099
	18				0.0248
	19				0.0245
	20				0.0203

Initial	Final	E = 1.6 Ryd	E = 2.0 Ryd	E = 3.0 Ryd	E = 8.0 Ryd
3	4	0.7865	0.7037	0.6250	0.4428
	5	0.2574	0.2141	0.1231	0.0944
	6	-	1.3505	1.4941	2.0294
	7		1.1047	1.1995	1.5277
	8		1.7606	1.9219	2.3708
	9			0.1386	0.0826
	10			0.0139	0.0085
	11			-	0.0458
	12				0.0085
	13				0.0310
	14				0.0156
	15				0.4032
	16				0.0799
	17				0.2662
	18				0.7277
	19				0.0833
	20				0.0609

Continued

Initial	Final	E = 1.6 Ryd	E = 2.0 Ryd	E = 3.0 Ryd	E = 8.0 Ryd
4	5	0.4302	0.3577	0.2068	0.1574
	6	-	0.0325	0.0298	0.0137
	7		1.7612	1.9547	2.6095
	8		5.2327	5.7378	7.4138
	9			0.2310	0.1442
	10			0.0232	0.0143
	11			-	0.0766
	12				0.0142
	13				0.0513
	14				0.0269
	15				0.0796
	16				0.7287
	17				0.0706
	18				0.3254
	19				1.3481
	20				0.1015

TABLE IV

Partial wave contributions to $\Delta\Omega^{\ell\ell'}(2s^2\ {}^1S - 2s2p^3P)$

$\ell = L^T\ell'$		Threshold $2s2p\ {}^1P$	$2p^2\ {}^3P$	$2p^2\ {}^1D$	$2p^2\ {}^1S$
0	1	0.037	0.000	0.000	0.000
1	0	0.033	0.003	0.000	0.000
1	2	0.003	0.000	0.000	0.000
2	1	0.002	0.001	0.002	0.000
2	3	0.000	0.003	0.000	0.000
3	2	0.119	0.000	0.000	0.000
3	4	0.001	0.000	0.000	0.000
4	3	0.003	0.000	0.002	0.000
4	5	0.000	0.000	0.000	0.000

TABLE V

$\Delta\Omega(2s2p\ ^3P_J - 2s2p\ ^3P_{J'})$

Threshold \ J - J'	0 - 1	0 - 2	1 - 2
$2p^2\ ^3P$	0.368	0.583	1.772
$2s3s\ ^3S$	0.005	0.008	0.025
$2s3d\ ^3D$	0.150	0.048	0.265
$2s2p\ ^1P$	0.034	0.033	0.117

CAPTIONS FOR FIGURES

Fig. 1. : Electron collision strength as a function of incident electron energy in Ryd for the $2s^2\ ^1S$ - $2s2p\ ^1P$ transition
- close coupling calculation → dot-dashed line (Osterbrock 1970, 2 cfs)
- distorted wave calculation → dashed line
- semi-classical calculation → full line

Fig. 2. : As in Fig.1, for the $2s2p\ ^3P$ - $2p\ ^3P$ transition

Fig. 3. : As in Fig.1, for the $2s^2\ ^1S$ - $2s3p\ ^1P$ transition

Fig. 4. : As in Fig.1, for the $2s^2\ ^1S$ - $2s2p\ ^3P$ transition

Fig. 5. : Electron collision strengths averaged over resonances for fine structure transitions in $2s2p\ ^3P$ as a function of energy E
- transition $^3P_o \rightarrow\ ^3P_1$ dashed line +
- transition $^3P_1 \rightarrow\ ^3P_2$ dot-dashed ×
- transition $^3P_o \rightarrow\ ^3P_2$ full line ⊙

Fig. 6. : Proton collision rates for fine structure transitions in the metastable state $2s2p\ ^3P$ as a function of T_e
The corresponding collision rates for fine structure transitions in the $2p^2\ ^3P$ state have the same values.

Fig. 7. : Population density $G(T_e, N_e)$ in cm^{-3} if $2s2p\ ^1P$ at $N_e = 10^8\ cm^{-3}$
The bar limits the temperature range of emission

Fig. 8. : As in Fig. 7, for $2p^2\ ^3P$

Fig. 9. : As in Fig. 7, for $2s3p\ ^1P$

Fig. 10 : Calculated relative emissitivty λ 760/λ 630 within a range of temperature $1.6\ 10^5$°K to $4\ 10^5$°K. The curves at $Te = 1.6\ 10^5$°K and $Te = 2.5\ 10^5$°K are superposed.

Fig. 11 : Calculated relative emissivity λ 760/λ 630 at Te = 2.5 $10^{\circ}K$ (full line) (1). Dashed curves (2) and (3) are the same curves shifted owing to the uncertainties in the collision strengths. Curve (5) is calculated using the atomic data given by Munto et al. (1971).
Curve (4) is the same curve as curve (1) but without including the resonances in the fine structure collision strength in $2s2p\ ^3P$.

Fig. 12 : Calculated relative emissivity ratio λ670/λ172 as a function of electron temperature
Curve 1 - average value for $\Omega(2s^2\ ^1S - 2s3p\ ^1P)$
Curve 2 - S.C. value for $\Omega(2s^2\ ^1S - 2s3p\ ^1P)$
Curve 3 - D.W. value for $\Omega(2s^2\ ^1S - 2s3p\ ^1P)$

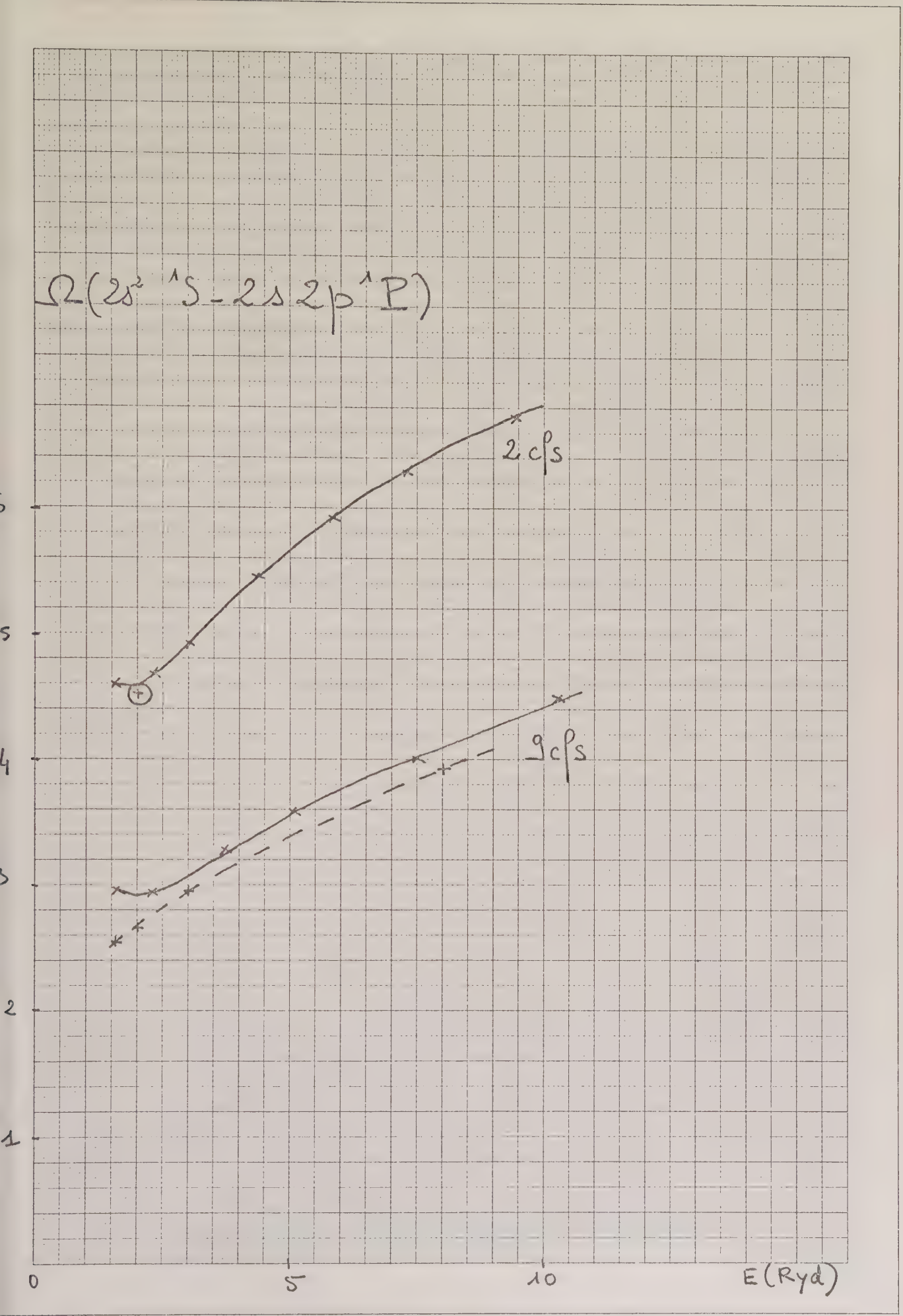


Fig 1

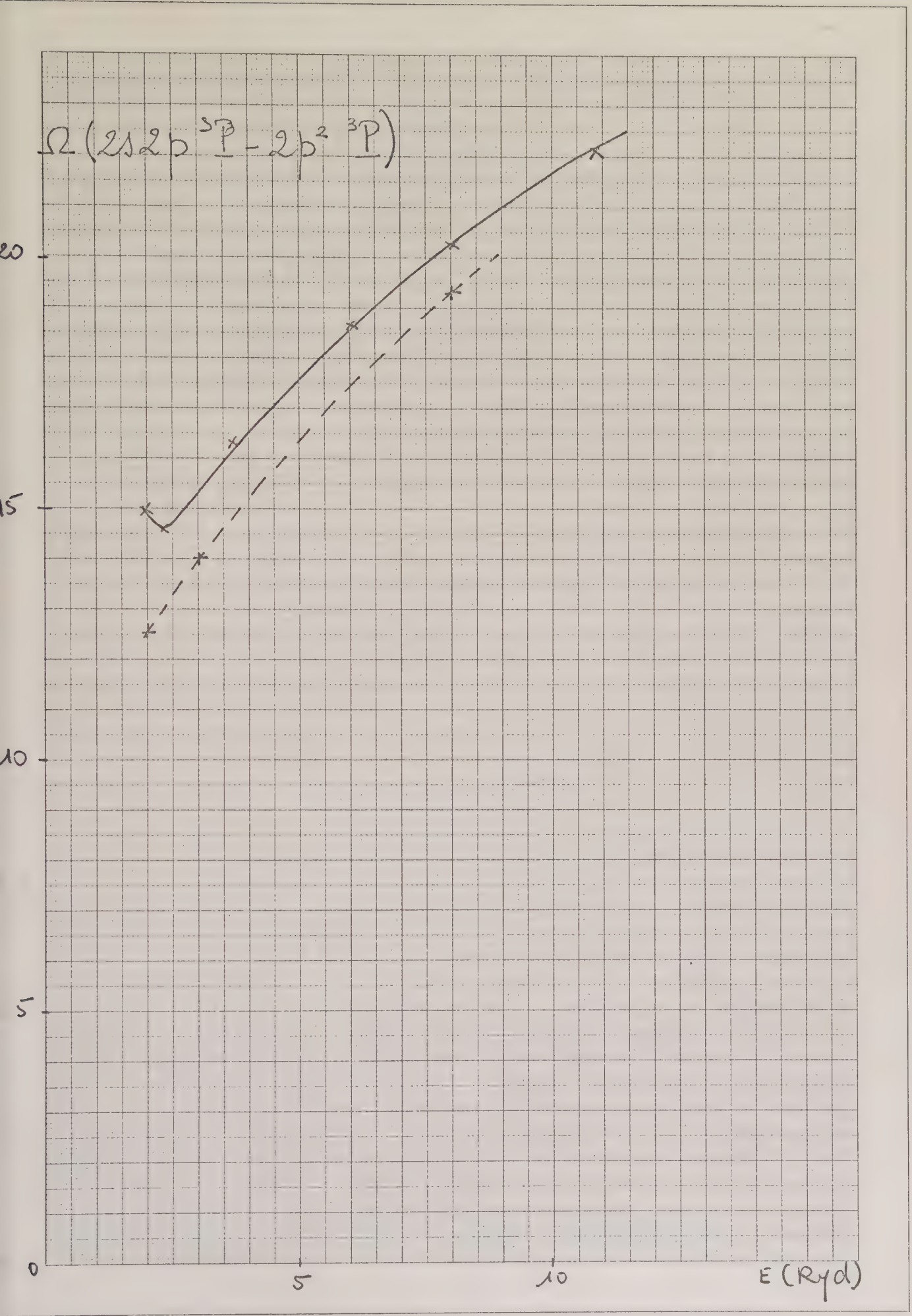


Fig 2

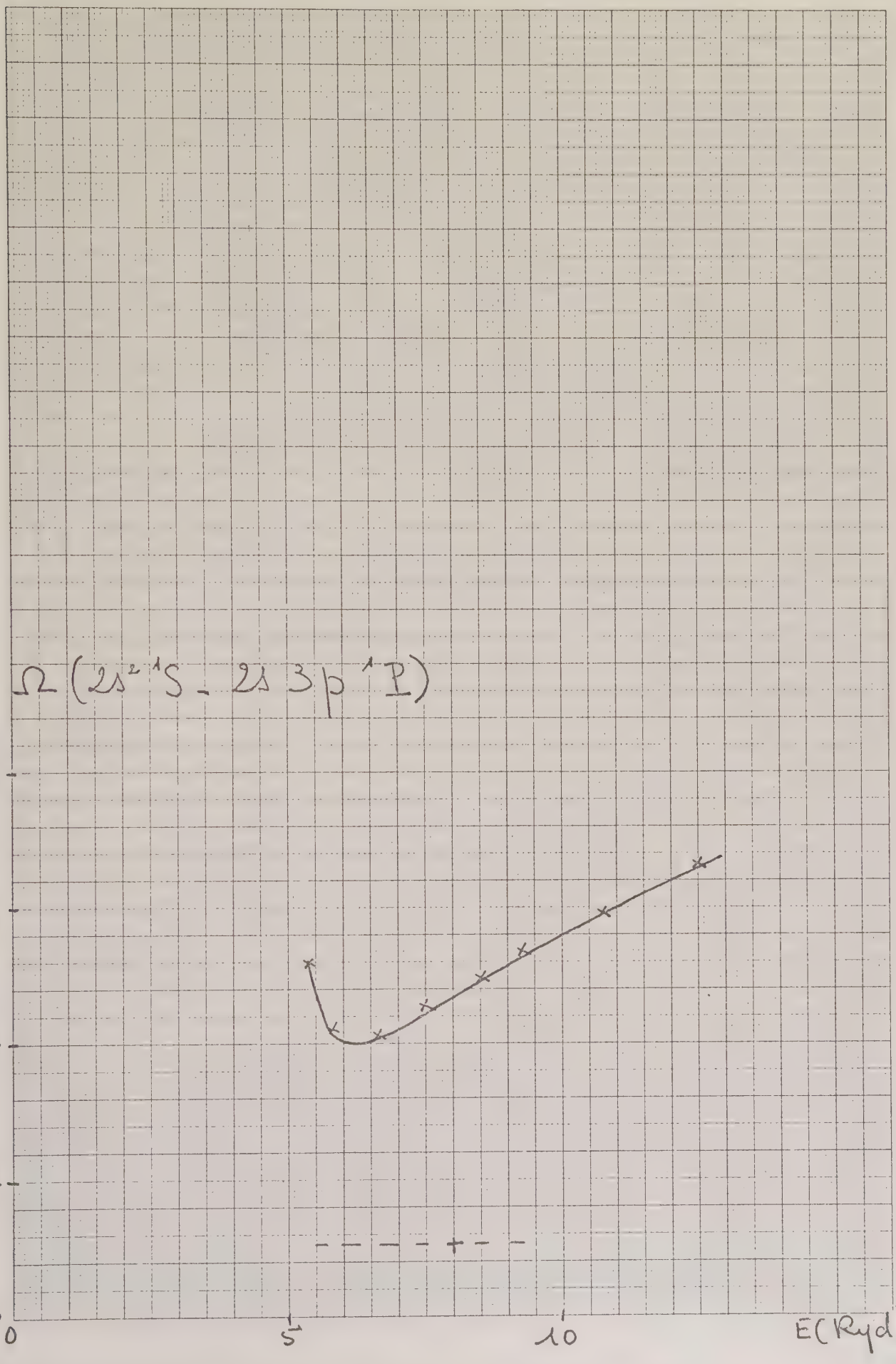


Fig 3

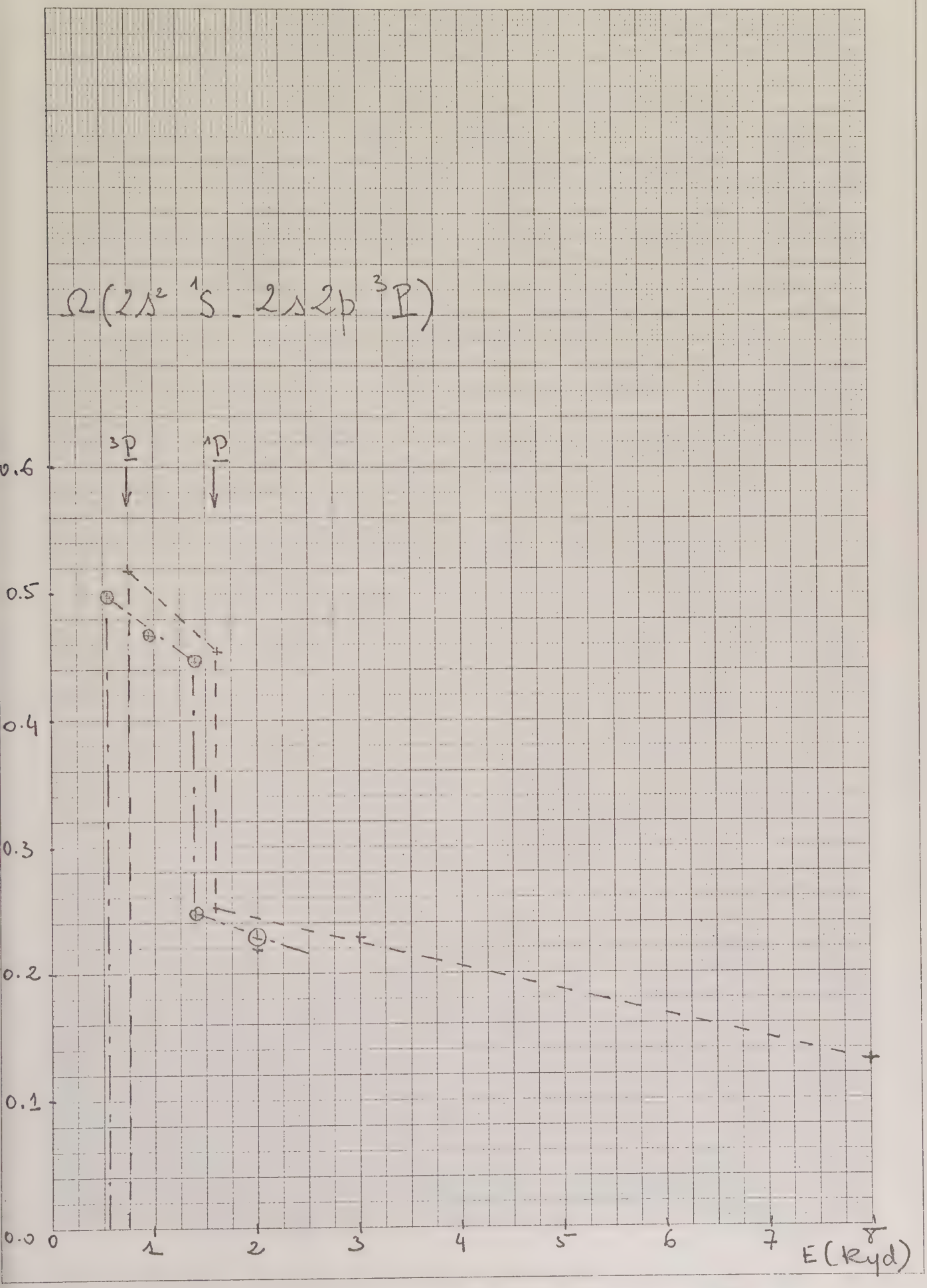


Fig 4

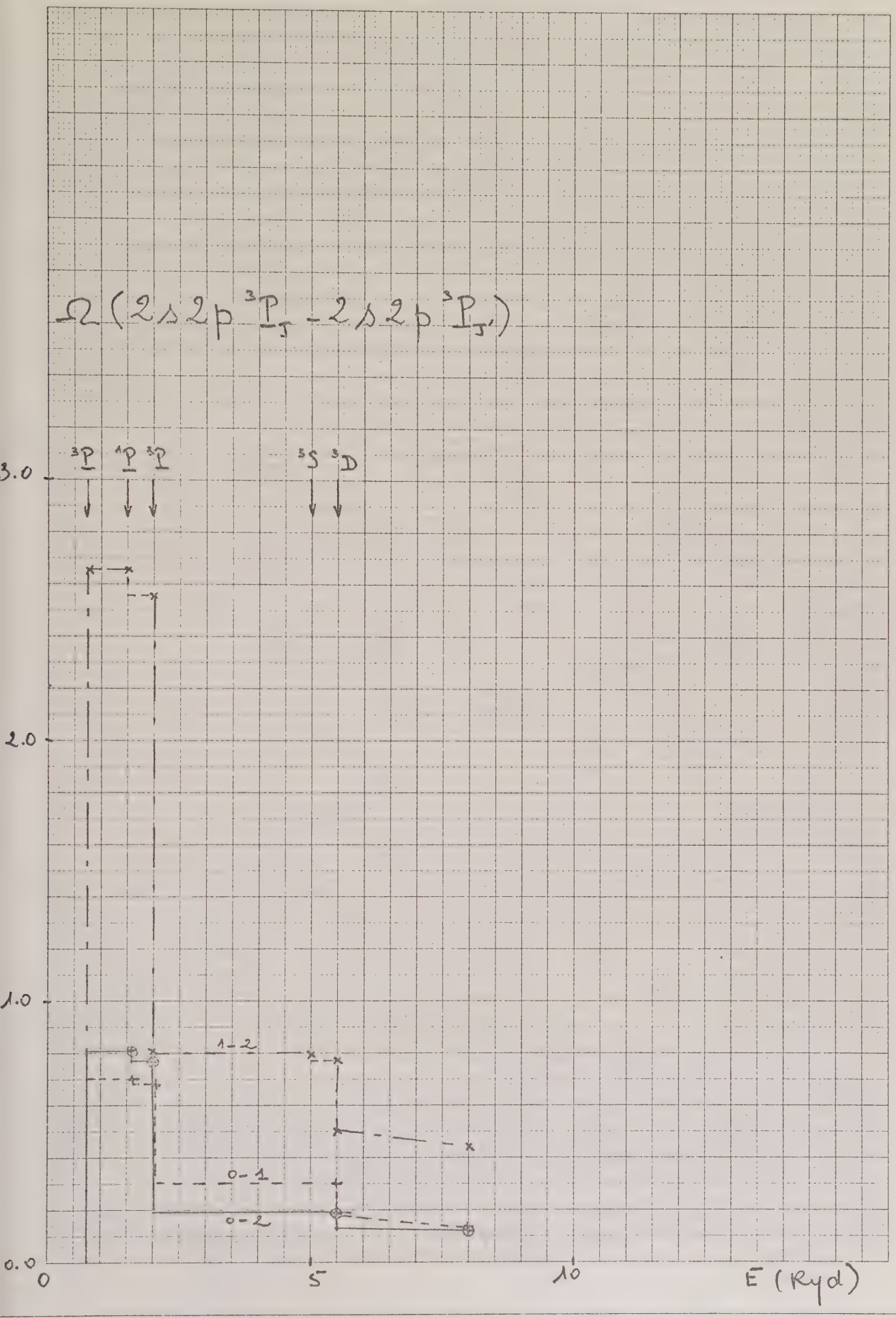


Fig 5

$\ell^{P}\,(2s\,2p\,{}^3P_J \rightarrow 2s\,2p\,{}^3P_{J'})$ $cm^3\,s^{-1}$

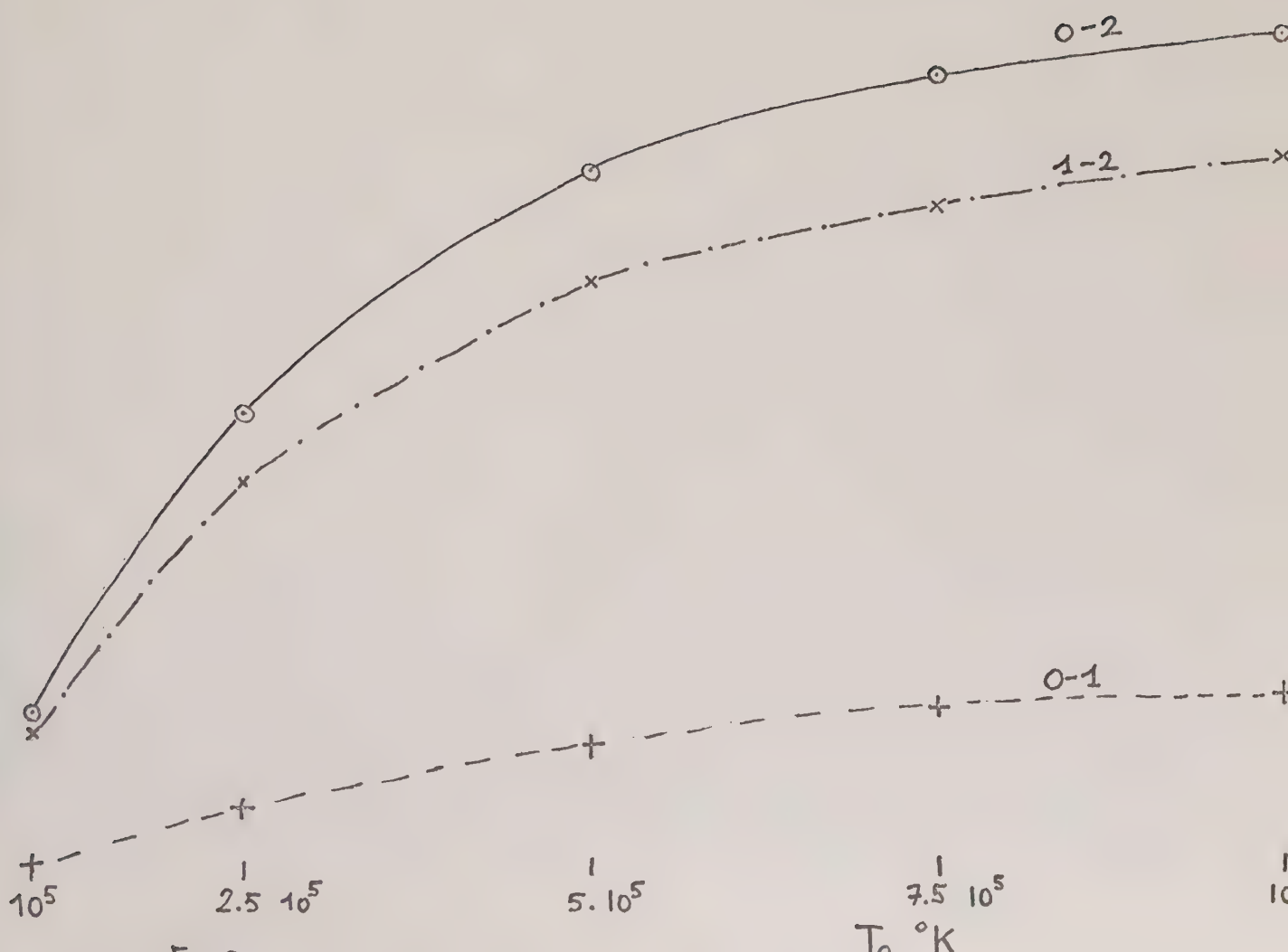
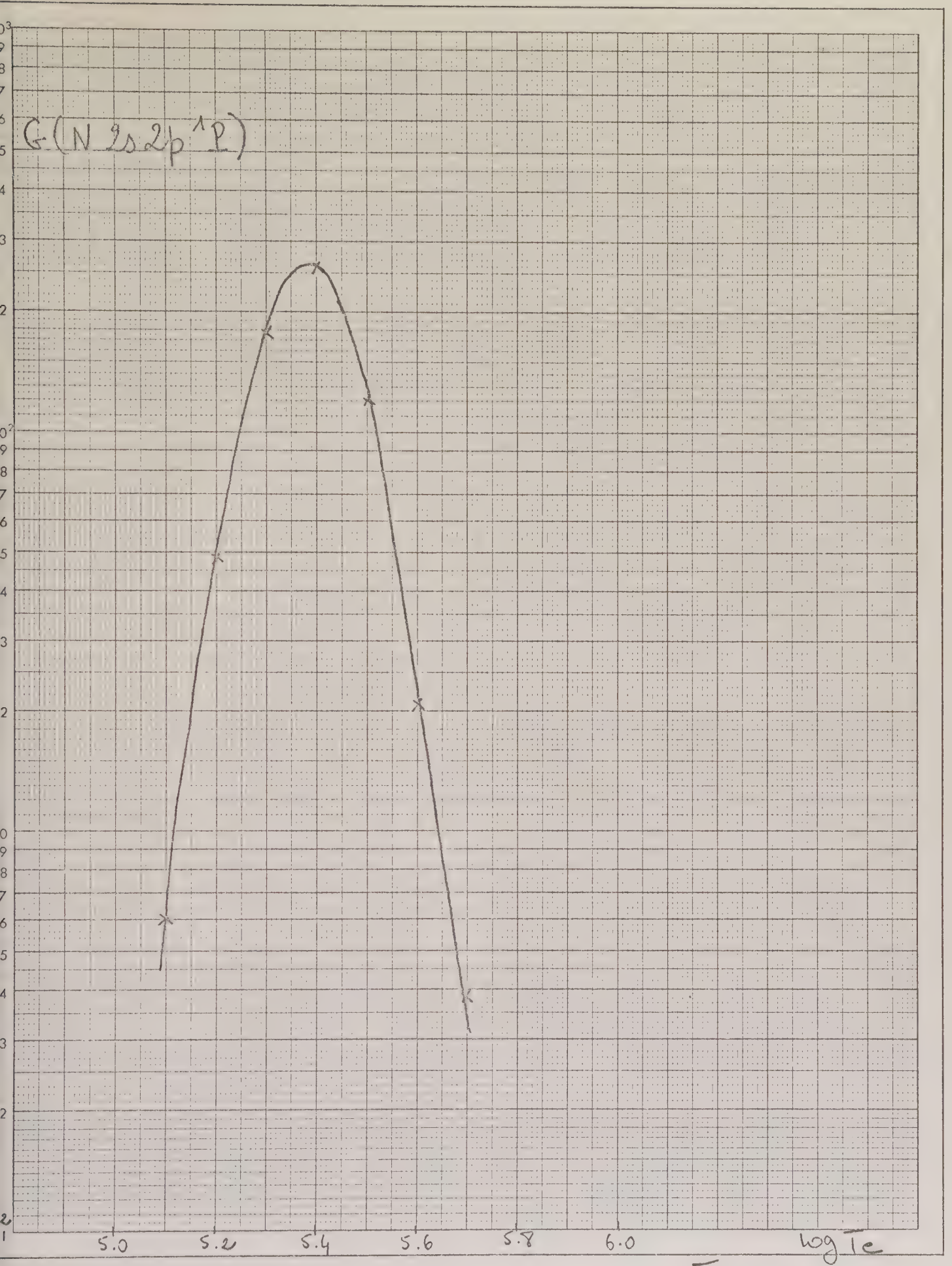


Fig 6



N° 1026

Fig 7

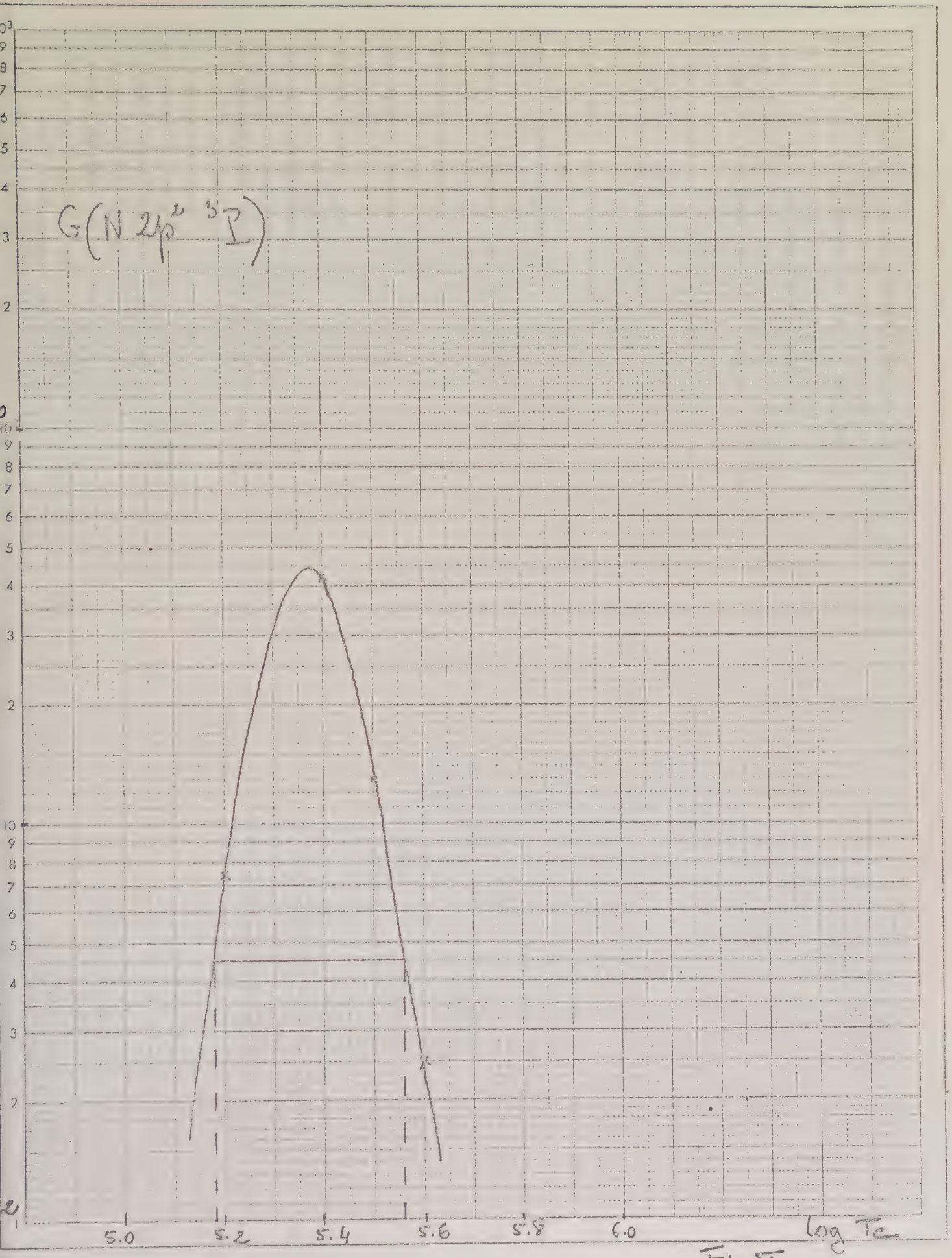
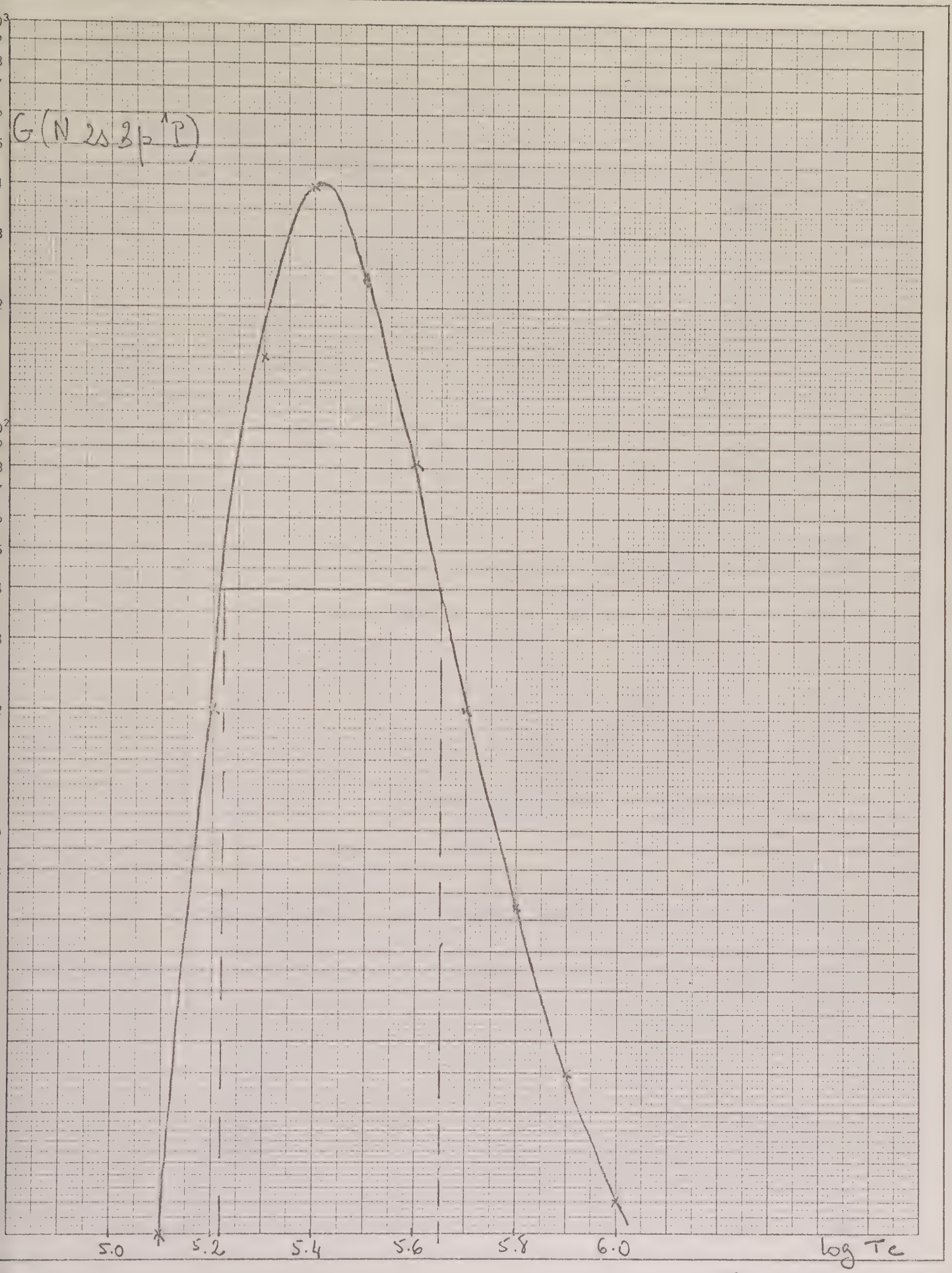

G(N 2p² ³P)
10³
9
8
7
6
5
4
3
2
10²
9
8
7
6
5
4
3
2
10
9
8
7
6
5
4
3
2
1
5.0
5.2
5.4
5.6
5.8
6.0
log Te

Fig 8



N° 1026

Fig 9

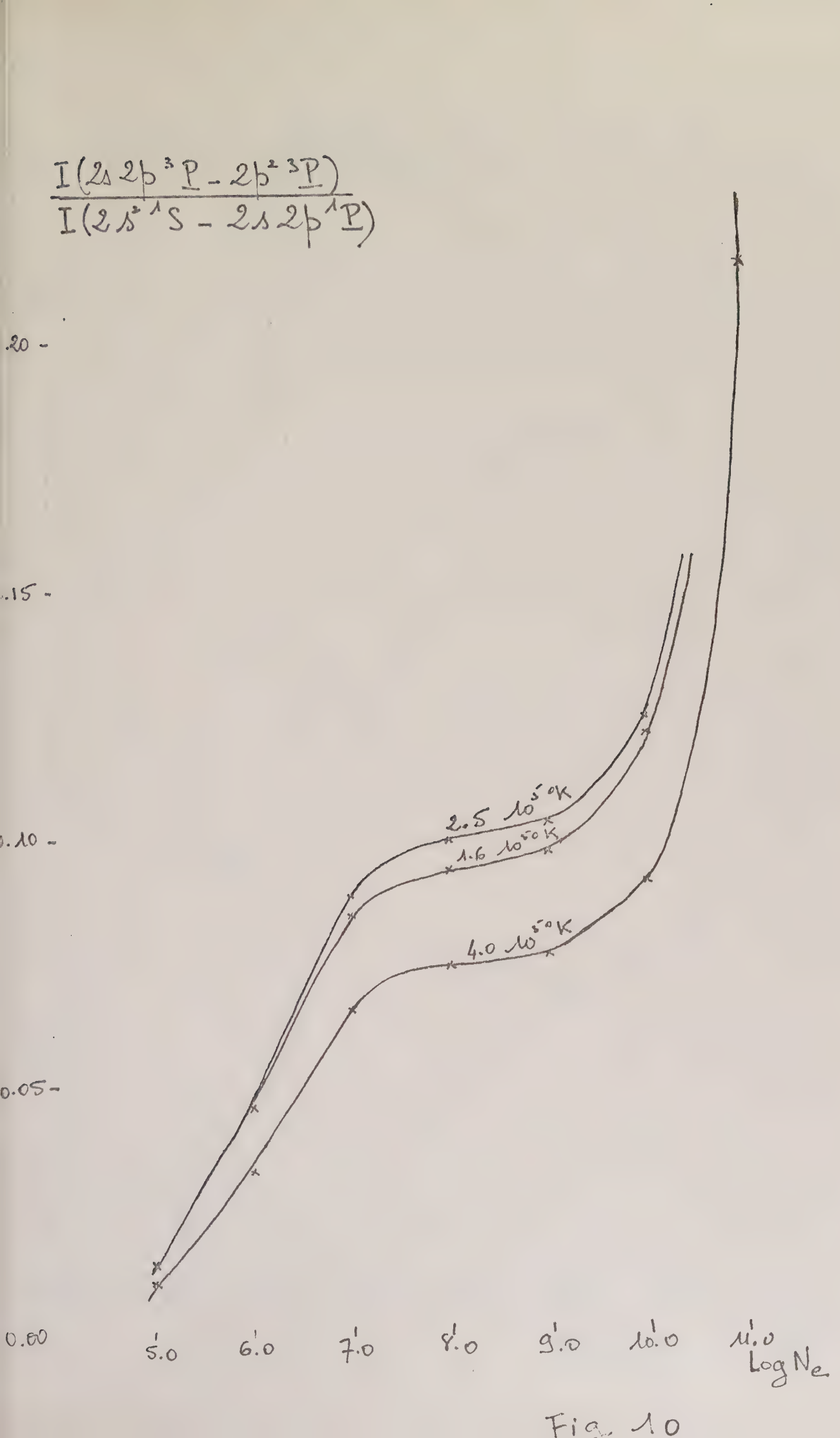

$\frac{I(2s2p\ ^3\underline{P} - 2p^2\ ^3\underline{P})}{I(2s^2\ ^1S - 2s2p\ ^1\underline{P})}$
.20
.15
.10
0.05
0.00
2.5 $10^{5°}$K
1.6 $10^{5°}$K
4.0 $10^{5°}$K
5.0
6.0
7.0
8.0
9.0
10.0
11.0
Log N_e

Fig. 10

$$\frac{I(2s2p\,{}^3P - 2p^2\,{}^3P)}{I(2s^2\,{}^1S - 2s2p\,{}^1P)}$$

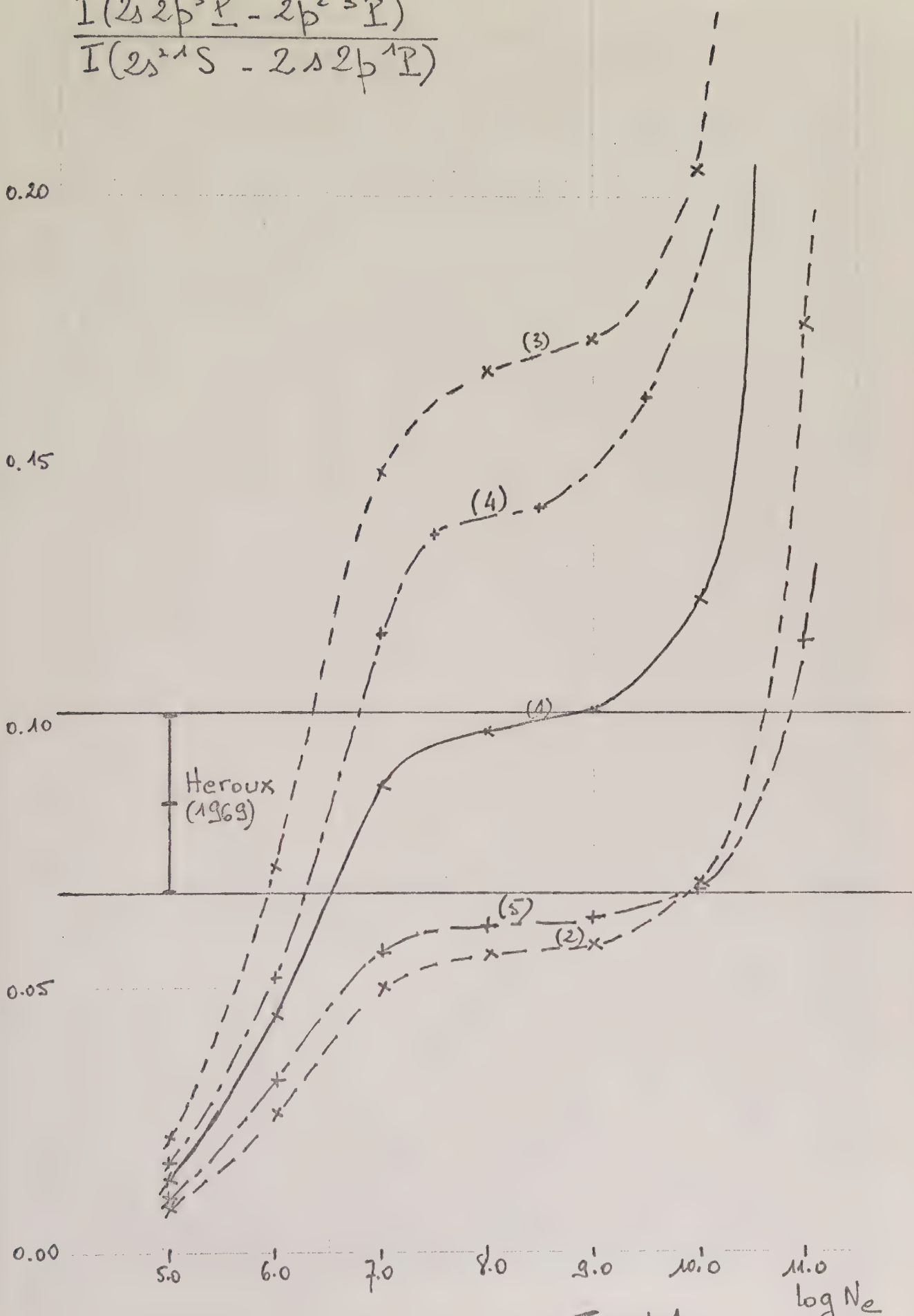


Fig 11

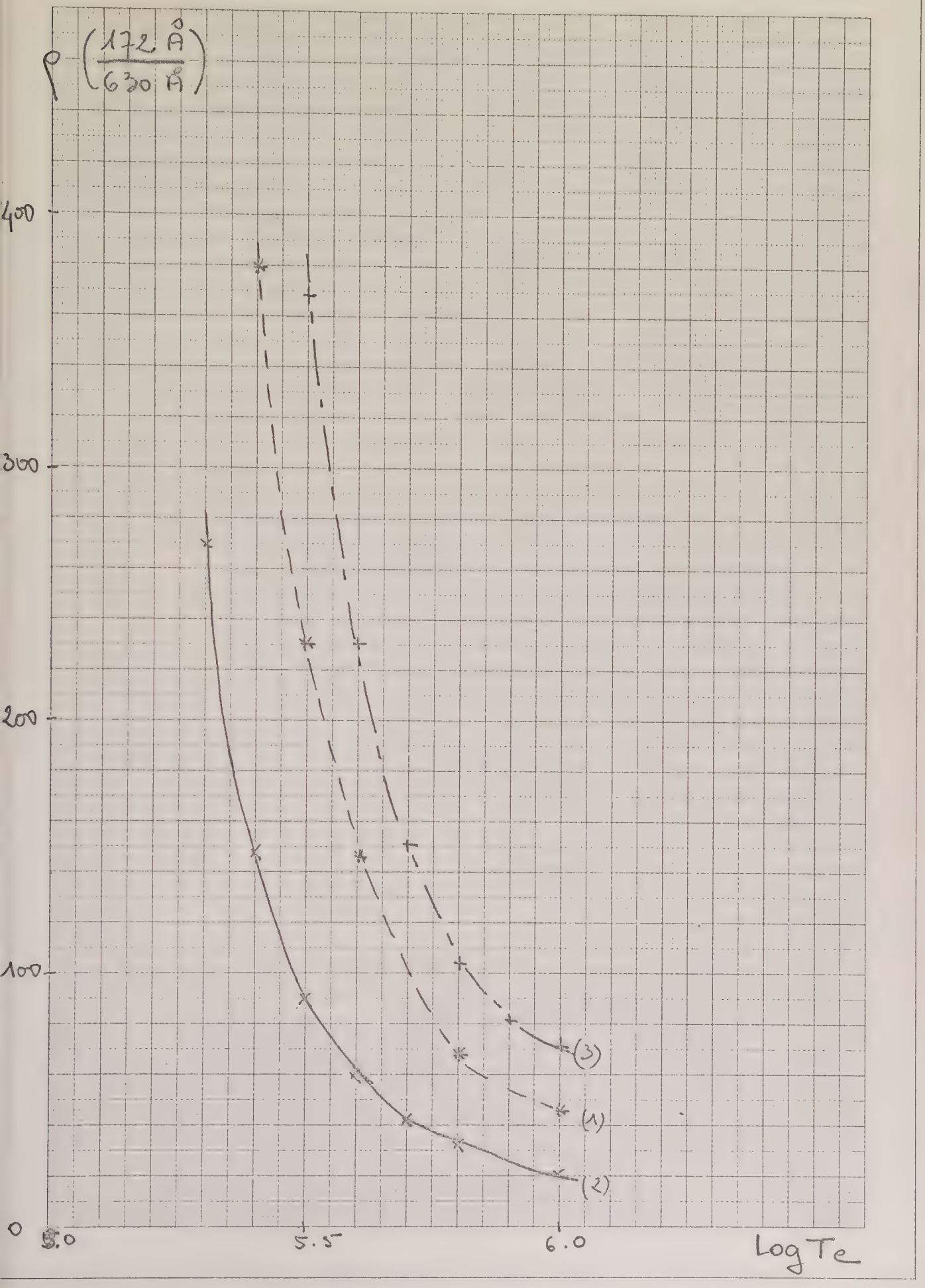


Fig 12

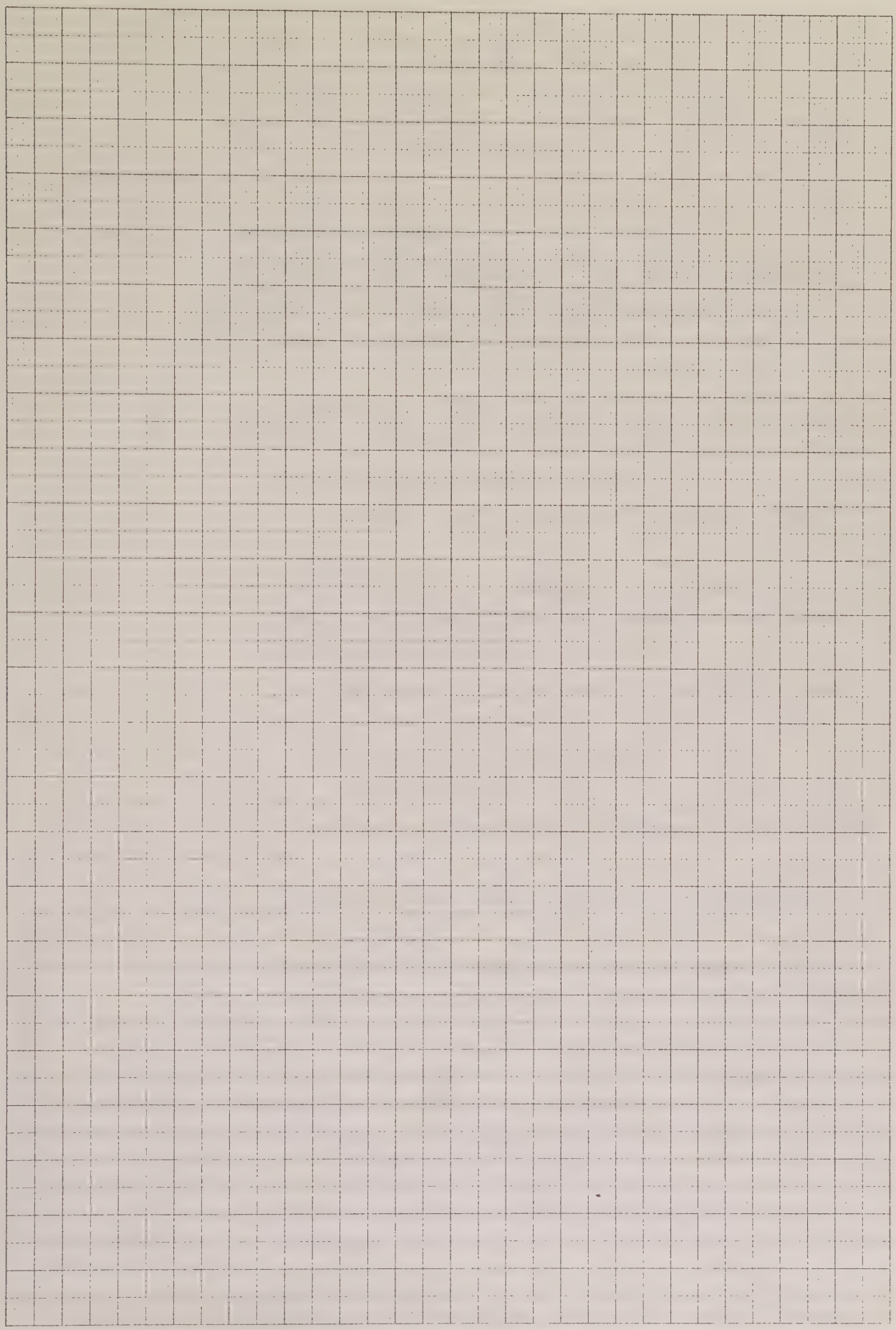


TABLE DES MATIERES

page

INTRODUCTION

CHAPITRE I STRUCTURE ATOMIQUE

1 - Généralités : hamiltonien d'un atome à plusieurs électrons, difficultés liées aux interactions entre électrons 1

2 - Approximation champ central : traitement de la partie radiale 8

2.1. Méthode de Thomas et Fermi

2.2. Méthode "self-consistente" de Hartree Fock

3 - Approximation champ central : traitement de la partie angulaire différentes sortes de couplages 15

3.1. Différents types de couplage

3.2. Choix de la base suivant le type de couplage

a) couplage LS pur

b) couplage intermédiaire

c) couplage jj

3.3. Ordre de grandeur des différentes interactions

4 - Introduction de l'interaction de configurations..... 26

5 - Importance de l'interaction de configurations. limites d'utilisation des divers programmes existants..... 27

CHAPITRE II PROBABILITES DE TRANSITION RADIATIVE 31

1 - Expression des probabilités de transition radiative

2 - Différentes règles de sélection suivant le type de couplage 38

3 - Effet de l'interaction spin orbite et de l'interaction de configurations sur les probabilités de transition 47

pages

4 - Critères de validité des fonctions d'onde
et des probabilités de transition 50

CHAPITRE III COLLISION 54

A - COLLISION ION-ELECTRON 56

1. Formulation du problème de choc

2. Conditions aux limites : Définition de la matrice de diffusion S et de la matrice de réactance R 63

2.1. Définition des matrices S et R

2.2. Propriétés des matrices S et R

2.3. Principe variationnel appliqué au calcul des éléments de la matrice R

3. Approximation de couplage faible 73

3.1. Approximation des ondes déformées

3.2. Approximation de Born et de Coulomb Born

4. Expression de la section de choc en terme des éléments de la matrice S 77

4.1. Définition de la section de choc et taux de collision

4.2. Expression de la section de choc en terme de la matrice S

5. Conditions de validité des approximations de couplage faible 84

5.1. Transition avec changement de spin de l'atome

5.2. Transitions sans changement de spin de l'atome

6. Approximation semi classique 89

6.1. Matrice de diffusion S semi classique

6.2. Résolution de l'équation de Schrödinger par la théorie des perturbations dépendant du temps

6.3. Obtention des sections efficaces

6.4. Condition de validité. Comparaison avec les méthodes quantiques

7. Variation de la section efficace avec l'énergie 100

7.1. Comportement au dessus de tous les seuils

7.2. Comportement au voisinage des seuils. Apparition des effets de résonance.

pages

B - COLLISION IONS-PROTONS 108

1. Equations couplées

1.1. Traitement quantique

1.2. Traitement semi classique

2. Approximation de couplage faible 109

CONCLUSION 112

REFERENCES 114

Appendice n° 1 Règles de sélection pour les probabilités de transition radiatives (couplage LS) 118

Appendice n° 2 Forme, longueur, vitesse, accélération du dipôle 119

Appendice n° 3 Limite semi classique de la formule de Gailitis pour le calcul de l'effet moyen des résonances dans le problème de collision atome-électron 121

Article 1 "The interpretation of XUV rocket measurements of intensity ratios of solar spectral lines of the lithium like ions OVI, Ne VIII and Mg X"..... 129

Article 2 "An analysis of the solar extreme-ultraviolet spectrum between 50 and 300 Å"..... 130

Article 3 "New calculations of atomic data concerning EUV lines of OV..... 131